~~E 8482~~
OF 1915
F
8482
(168)

ANALELE UNIVERSITATII BUCURESTI

FIZICĂ

ANUL XX — 1971

ANALELE
UNIVERSITĂȚII
BUCUREȘTI

FIZICĂ

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
Országos Műszaki Információs Központ és Könyvtár
2001

Anul XX – 1971

1989

FIZICA

BME KÖZPONTI KÖNYVTÁRA
F
8782
FOLYÓIRAT OSZTÁLY

COMITETUL DE REDACŢIE

Redactor responsabil: Prof. dr. docent *Gh. Brătescu*
Membri: Acad. prof. dr. docent *Th. V. Ionescu*; acad. prof. dr. docent *Şerban Ţiţeica*; prof. dr. docent *Ion Ursu*, membru corespondent al Academiei R. S. România; prof. dr. docent *V. Novacu*, membru corespondent al Academiei R. S. România; prof. dr. *Cristian Constantinescu*; prof. dr. *Mihai Gavrilă*.
Secretar: Conf. dr. *Constantin Vrejoiu*.

BUDAPESTI MŰSZAKI EGYETEM
1848
KÖZPONTI KÖNYVTÁR

Budapesti Műszaki Egyetem
Központi Könyvtára
Folyóirattár
P298/1972

REDACŢIA
ANALELE UNIVERSITĂŢII BUCUREŞTI
B-dul Gh. Gheorghiu-Dej nr. 64
Telefon 160187/5

SUMAR

Pag.

G. G. BRĂTESCU şi S. IONIŢĂ: Potenţiale de aprindere Paschen în amestecuri de aer şi metan 9

N. GHERBANOVSCHI: Instalaţie experimentală pentru studiul conductibilităţii şi constantei dielectrice a gazelor slab ionizate 15

LIVIA MARIA IONESCU: Măsurători de admitanţă în banda de frecvenţă 1—200 MHz cu ajutorul unei punţi capacitive 21

G. G. BRĂTESCU şi T. TUDOR: Asupra funcţiei de coerenţă generalizată 29

VASILE N. DIMA: Aplicarea teoriei statistice a lichidelor în ultraacustica moleculară 35

VASILE P. MIHU şi LEON ST. STAICU: Consideraţiuni privind propagarea ultrasunetelor în solidele elastice policristaline 43

I. C. PETREA: Reticularizarea intermoleculară a polimerilor 51

ION BĂIANU: Transferul rezonant de energie în oncogeneză........ 57

IRINA RUSU şi D. G. MĂRGINEANU: Aplicarea termodinamicii proceselor ireversibile la studiul contracţiei musculare 59

СОДЕРЖАНИЕ

Стр.

Г. Г. БРЭТЕСКУ и С. ИОНИЦЭ: Электрический пашеный потенциал от зажигаться смеску от воздухам и метаном 9

Н. ГЕРБАНОВСКИ: Экспериментальная установка для изучения проводимости и диэлектрической постоянной ионизированных газов 15

ЛИВИА МАРИЯ ИОНЕСКУ: Измерение проводимости с помощю емкостного моста в диапазоне частот 1—200 MHz 21

Г. Г. БРЭТЕСКУ и Т. ТУДОР: О взаимной когерентной обобщенной функции 29

ВАСИЛЕ Н. ДИМА: Применение статистической теории жидкостей в молекулярной ультраакустике 41

В. МИХУ и Л. СТАЙКУ: Рассмотрения касающиеся распространения ультразвука в поликристалических упругих твёрдых телах 43

И. К. ПЕТРЯ: Межмолекулярное сшивание полимеров 51

ИОН БЭЯНУ: Резонансный трансферт энергии 57

ИРИНА РУСУ и Д. Г. МЭРДЖИНЯНУ: Применение термодинамики необратимых процессов к изучению мышечного сокращения 59

CONTENTS

Page

G. G. BRĂTESCU and S. IONIŢĂ: Paschen Sparking Potentials in Mixtures of Air and Methane 9

N. GERBANOVSCHI: Instalation expérimentale pour l'étude de la conductivité et de la permittivité des gaz faiblement ionisés 15

LIVIA MARIA IONESCU: Admittance Measurements in the 1—200 MHz Frequency Band by Means of a Capacitive Bridge 21

G. G. BRĂTESCU and T. TUDOR: On the Generalized Coherence Function 29

VASILE N. DIMA: The Application of the Statistic Theory of Liquids in the Molecular Accoustics 41

VASILE P. MIHU et LEON ST. STAICU: Considérations concernant la propagation des ultrasons dans des solides élastiques polycristallins 43

I. C. PETREA: La réticulation intermoléculaire des polymères............ 51

ION BĂIANU: Resonant Transfer of Energy in Oncogenesis................ 57

IRINA RUSU and D. G. MĂRGINEANU: Nonequilibrium Thermodynamical Study of Muscular Contraction 67

PASCHEN SPARKING POTENTIALS IN MIXTURES OF AIR AND METHANE

G. G. BRĂTESCU* and S. IONIŢĂ**

1. INTRODUCTION

Sparking potentials according to p.d., given under the form of Paschen curves, were determined in certain gases or gas mixtures or vapours. (1) The results for air, methane and other hydrocarbons are given in the reference materials (2) (3) (4).

In the prezent work there are shown the results obtained for Paschen curves of air-methane mixtures, namely for the samples collected from different places in the Uricani coal mine. These samples were examined not only under the influence of the electric fields, but also of the irradiation by radiations emitted by Hg-lamps for obtaining suplementary information, on complex phenomena which accompany the Paschen sparking and the explosion effect of the mentioned mixtures, which, according to our knowledge, is not yet included in the present reference materials.

2. THE EXPERIMENTAL DEVICE AND THE WAY OF WORKING

The experimental device used for drawing the Paschen curves for air and methane mixtures is schematically given in *fig. 1*. It was used a T-form discharging tube of 8 mm Razoterm glass walls and with Rogowski profile brass *A* and *K* electrodes. The *K* cathode moved by means of the magnetic system *B—M*. The M support of the cathode may be screwed in the *R* and *Q* nuts in order to change the distance between the *A* and *K* electrodes. The distance has been measured by *I* index on the *B* dial.

The discharging tube had a quartz window *F*, a diaphragm *D* and a *Hg* vapour lamp *L*.

The discharging tube has been evacuated by means of a three-trap vacuum installation through the R_1 tap, it has been filled then with the

---

* Permanent address: Facultatea de Fizică-Universitatea Bucureşti — str. Cpt. Preoţescu, 16, Sect. 5, Bucureşti.

** Permanent address: Institutul de Petrol-Ploieşti str. Aviatorilor, 1, Bl. 17, apt. 6-Ploieşti.

gas to be studied through the R_2 tap, after that it has been gradually aspirated by means of the vacuum pump too, through the R_1 tap untill the required pressure was reached. This was repeated when each gas sample was changed and the tube is cleaned by means of a current of pure air. The gas pressure has been measured by an I.F.A. type vacuum-meter.

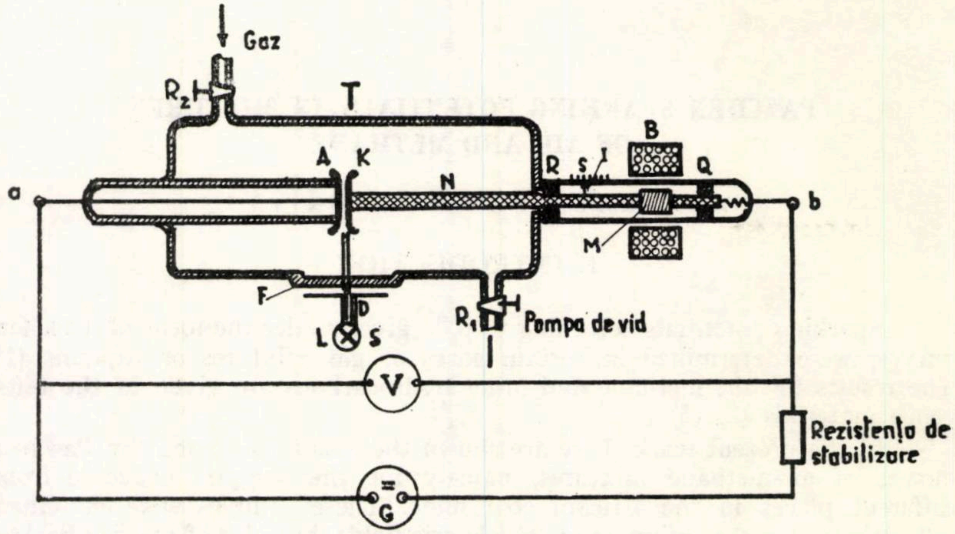

Fig. 1. The schematically experimental device.

The electric tension produced by the G generator is measured by a V electric voltmeter. It has been used a divider with which the G generator is provided.

The Hg-lamp is connected to a stabilized 100 V. continuous current.

3. THE EXPERIMENTAL RESULTS

In order to search the phenomena that happen in the electric discharges in the natural mixtures of air and methane (and other components) we got 40 gas samples from the Uricani coal-mine.

The presence of methane in these working places and particularly those quantities from 4 to 25 per cent of methane bring about great difficulties to the working process. Moreover it has been observed that not only 5 to 15 percent methane concentrations provide a fire-damp atmosphere (in the mine), but also concentrations out of this interval may present explosion danger under certain present conditions like: pressure, temperature, air currents etc. There is not to be found data or any other information about the influence provided by the lighting system of the mines on the explosion parameters of the fire damp, in the reference materials.

The air and methane mixtures of the searched samples at low values of the p.d. to 1.2 torr/cm, show characteristic curves according to Paschen's law. A shift of the minimum of the Paschen curve, from 0.5 to 0.41 torr/cm, appears depending on concentration. The shift of the entire Paschen curve to lower values of the p.d. but to higher values of the „V" is to be found in other cases shown in the reference material. In the diagrams in the *fig. 2* one can notice the normal way for Paschen curves of all searched samples.

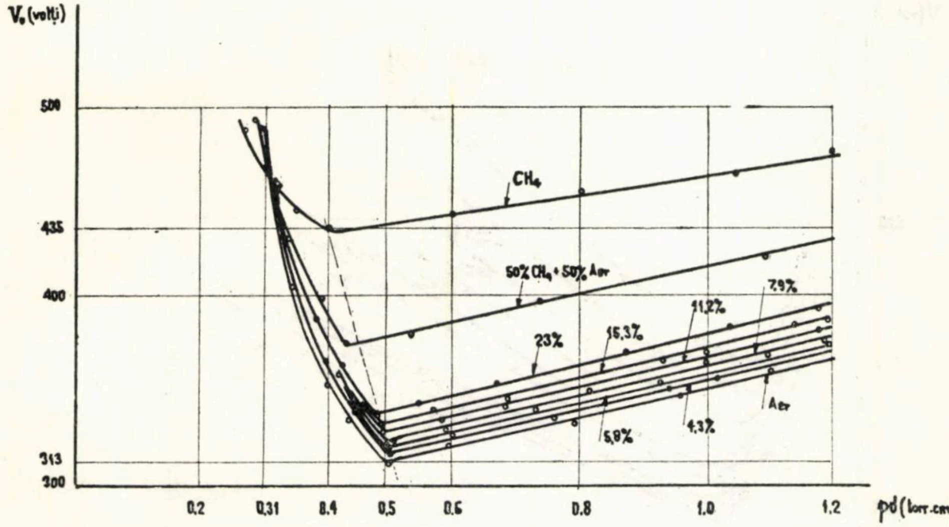

Fig. 2. Sparking potentials in the natural mixtures of air and methan.

When the gas mixtures is irradiated by a pencil of radiations provided by a Hg-lamp type, a lamp of 150 W, *fig. 3* — all Paschen curves shift. The minimums are at higher values of p.d. and the sparking potentials become lower.

This effect is due to the bigger efficiency in the gas ionization in the electric field owing to the ionizations provided by the incident photons. There is also to be observed that for high values of p.d, the slopes of the Paschen curves are slightly increased.

In the 4th figure there are given the results for 10 out the 40 samples gathered in the mine in the case of a more intense irradiation. It is to be found that the sparking potentials at a very high value of p.d. are greately modified in the presence of a more intense irradiation, provided by a 300 W type Hg-lamp, under the same geometric and physic conditions as in the preceeding case. The minimums of the Paschen curves have practically the same values for p.d., i.e. between 58.4 and 61.2 torr/cm.

A conclusion that can be also drawn from the *fig. 4,* is that for higher values of p.d. deviations from the Paschen's law appear.

For the air sample for p.d. values higher than p.d. = 220 torr/cm the slope of the curve is greately changed. For other samples of air and methane

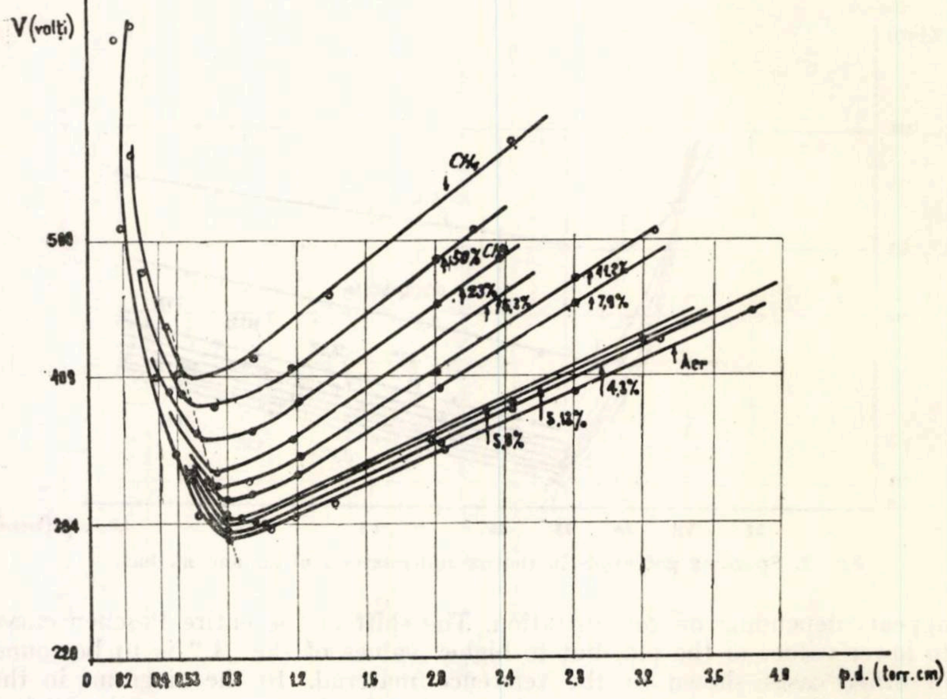

Fig. 3. Sparking potentials in the irradiated gas mixtures.

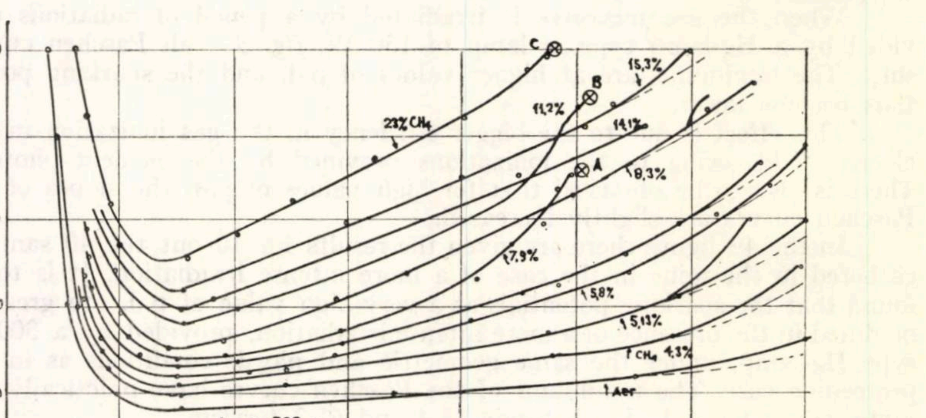

Fig. 4. Sparking potentials in the more intense irradiated gas mixtures. — the samle explode.

mixtures, this variation appears for p.d. values over 224, 228, 245, 250 torr/cm. For samples with 7,9; 11,2 and 23 per cent methane from the p.d. values of 180, 172 and 165 torr/cm the Paschen curves have very big slopes.

For the same values of p.d. of 208, 202 and 192 torr/cm for whcih one can obtain the sparking potentials of 1530, 1700 and 1940 V, the samples explode. The explosion takes place at about two seconds after it has been applied the Paschen tension according to the given p.d. The tube made of 8 mm-thick Razoterm glass walls has always been completely destroied. For these values of p.d. the electric discharging takes place in the place between the two electrodes which are at a distance of 0.4 cm of each other, and the screened pencil of light had irradiated only this area between the electrodes. A spread of the explosion took place in the whole discharging tube, then.

Experiments were repeated in the same conditions, the Hg-lamp being provided with a filter leaving radiations between 4380—3610 Å.

In this case Paschen curves change, leading off from p.d. values greater than 220 torr.cm, a decrease of slope taking place for the Paschen curves in this domain.

The explosion takes place, this time, for the samples with 5,8%, 8,3% and 15,3% methane for pd values of 258, 245 and 230 torr.cm and or sparking potentials of 1208, 1800 and 2009 V.

4. CONCLUSIONS

The experimental data given in this work show that the Paschen sparking potentials depend on the concentration of gas mixtures, on the effects arrising in this mixtures owing to radiations emitted by a Hg-vapour lamp and in certain conditions of irradiation and concentration the effect of explosion of the gas mixture, appears.

Other investigations on the complex phenomenons which appear in the explosive mixtures of gases, owing electrical discharges, will be continueted

REFERENCES

1. Brătescu G.: „Fizica Plasmei" Ed. Didactică și Pedagogică, București, 1970.
2. Bădărău E. și I. Popescu: „Gaze ionizate" Ed. Tehnică, București, 1963, 1965.
3. Engel A. von.: „Ionized Gases" Clarendon Press, Oxford, 1965.
4. Badareu E, F. Wächter: Rev. Phys. Roum. 1, 161 (1956)

INSTALATION EXPÉRIMENTALE POUR L'ÉTUDE DE LA CONDUCTIVITÉ ET DE LA PERMITTIVITÉ DES GAZ FAIBLEMENT IONISÉS

NICOLAE GHERBANOVSCHI

1. INTRODUCTION

L'étude expérimentale de la permittivité et de la conductivité électrique d'un milieu gazeuse soumis à l'action des champs électromagnétiques de HF, se trouvant ou non dans un champ magnétique constant et homogéne, a commencée dans la deuxieme décennée du vingtième siècle. Ces expériences avaient pour but d'élucider le mécanisme de la propagation des ondes hertziennes autour du globe terrestre ou, pour être plus précis, le rôle joué par l'air ionisé (ionosphère) dans cette propagation.

L'intérêt marqué pour ces études a été dû aussi à la théorie de la réfraction magnéto-ionique de Eccles (1912), par laquelle celui-ci expliquait la propagation des ondes hertziennes autour de globe terrestre par l'accroissement de leur vitesse de phase due à la présence des ions moléculaires dans la haute atmosphère.

Le procedé expérimental, permettant l'étude des propriétés électriques et magnétiques des gaz ionisés, consiste, en général, en la détermination de la modification des paramètres d'un résonateur par suite de la présence d'une certaine quantité de gaz ionisé dans la région où se trouve le champ électromagnétique du résonateur.

Appleton [1] et d'autres ont appliqué la méthode de la modification de la capacité d'un condensateur-appartenant à un circuit oscillant LC-entre les armatures duquel se trouve de l'air faiblement ionisé en vue d'étudier la permitivité de l'air à divers degrés d'ionisation.

Th. V. Ionescu, dans un grand nombres d'études concernant la permittivité et la conductivité des gaz ionisés, ainsi que la structure des ions négatifs moléculaires, s'est servi soit des résonateurs conventionnels, soit des résonateurs à fils (fils de Lecher ou résonateurs coaxiaux) [2] et a établi une théorie complète de la modification de la capacité d'un condensateur entre les armatures duquel se trouve un gaz ionisé [3].

Ces derniers temps, en vue de nouvelles méthodes possibles pour diagnostiquer le plasma [4], on emploie des petites sondes consistant en fils rectilignes de tungsten immergés dans le gaz ionisant et auxquels on applique des fréquences de 800—1000 MHz.

L'emploi des fréquences toujours plus élevées a conduit à la nécessité d'utiliser les résonateurs de volume (cavités résonantes) à l'étude des propriétés du plasma en tant que système de gaz ionisé.

Dans ce travail, on trouve la description d'une installation expérimentale permettant d'étudier la variation de la permittivité et de la conductivité électrique des gaz ionisés par suite des variations de paramètre (fréquence, degré d'ionisation, champ magnétique).

2. DESCRIPTION DU DISPOSITIF EXPÉRIMENTAL

Le schéma du résonateur *LC* est représenté par la figure 1. Le condensateur de mesure C_m, entre les armatures duquel se trouve le gaz ionisé par une décharge électrique dans un tube, soit à électrodes froides, soit à cathode chaude, consiste en deux feuillets rectangulaires d'aluminium, fixés vis-à-vis l'un de l'autre sur le tube à décharge et qui compreunent la région analysée de la décharge électrique. En parallèle avec ce condensateur, il y a un condensateur variable d'accord C_v dont la capacité varie linéarement. L'ensemble de condensateurs $C_m + C_v = C$ forme la capacité du résonateur, dont l'inductance consiste en un solénoïde avec un nombre plus ou moins grand de spires suivant que la fréquence de travail est plus ou moins élevée.

Le circuit de redressement formé de deux diodes détectrices et d'une cellule de filtrage, prend sa tension de deux spires, symétriques par rapport au milieu du solénoide, auquel est fixée la prise médiane du circuit de redressement. La tension redressée et filtrée est mesurée par un galvanomètre dont la constante et la période propre ont des valeurs appropriée.

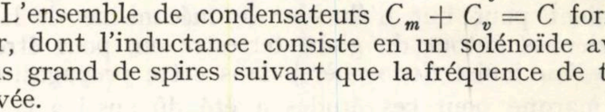

Fig. 1

Le résonateur *LC* est faiblement couplé, inductivement, avec un générateur d'oscillations de *HF*, dont la fréquence et la tension de sortie sont capables d'assurer, en l'absence de la décharge dans le tube, une même déviation maximale du spot du galvanomètre, lorsque le résonateur est accordé a la fréquence de travail du générateur au moyen du condensateur C_v.

Les valeurs ainsi obtenues pour le facteur de qualité Q du résonateur (fig. 2) montrent que le circuit de mesure, destiné à mettre enév idence l'amortissement du résonateur lorsqu'il y a une décharge dans le tube, se comporte comme un microvoltmètre à grande impédance d'entrée.

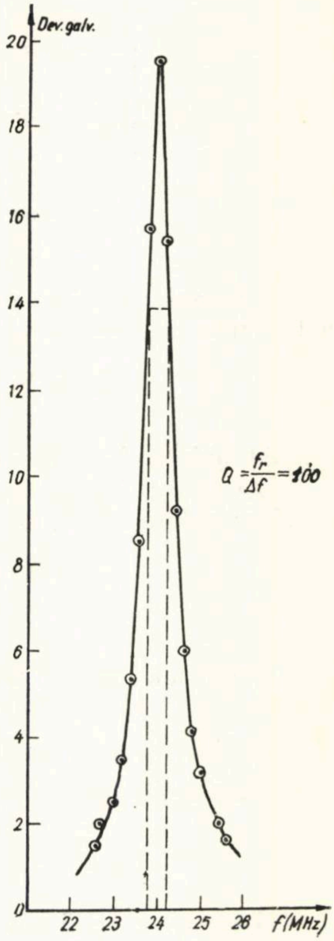

Fig. 2

3. THÉORIE DU RÉSONATEUR. ELIMINATION DE L'EFFET DE CONDUCTANCE.

Le résonateur à constantes concentrées décrit ci-dessus, dont le schéma équivalent est représenté par la figure 3, est excité par un générateur de tension (résonance e série ou résonance de tension).

On peut démontrer qu'en excitant le résonateur par un champ électrique au lieu d'un champ magnétique (résonance de courant), on évite les difficultés apparaissant orsqu'on détermine la variation de la permittivité du gaz ionisé (diélectrique), par suite du fait qu'en dérivation avec le condensateur de mesure on a introduit une résistance équivalente noninductive R_e, due à la conductivité du gaz ionisé placé entre les armatures du condensateur (fig. 4).

Soit, donc, $u = u_0 \sin \omega t$ la tension électromotrice instantanée agissant dans le résonateur LC; si l'on combine les lois de Kirchhoff appliquées à ce type de circuit résonant

$$L \frac{di_L}{dt} + R_L i_L - u_0 \sin \omega t = \int \frac{i_c dt}{C} = -v$$

où v désigne la tension instantanée entre les points a et b, on obtiendra l'équation différentielle

$$\frac{d^2v}{dt^2} + \left(\frac{R_L}{L} + \frac{1}{R_e C}\right)\frac{dv}{dt} + \frac{1}{LC}\left(1 + \frac{R_L}{R_e}\right) v = \frac{u_0}{LC} \sin \omega t.$$

La solution de cette équation est

$$v = A \sin (\omega t - \theta)$$

où

$$A = \frac{u_0}{LC \sqrt{\left(\frac{R_L}{L} + \frac{1}{R_e C}\right)^2 \omega^2 + \left[\frac{1}{LC}\left(1 + \frac{R_L}{R_e}\right) - \omega^2\right]}}. \tag{1}$$

MŰSZAKI

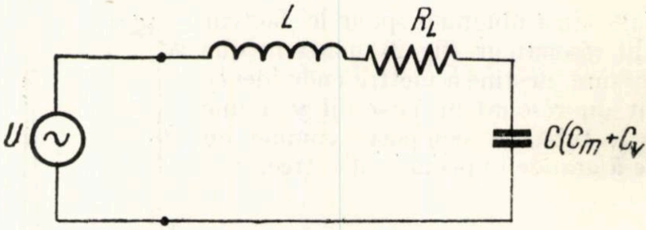

Fig. 3

La valeur maximale de A — condition de la résonance — correspondra a la valeur suivante de C

$$C = \frac{L}{L^2\omega^2 + R_L^2} \tag{2}$$

qui est indépendante de R_e.

Avec cette condition de résonance d'amplitude (2), la formule (1) de A se réduit à

$$A = \frac{u_0}{R_L\sqrt{\frac{L}{C}} + \frac{1}{R_e}\sqrt{\frac{L}{C}}}. \tag{3}$$

Pour une valeur donnée de ω, l'amplitude à la résonance dépend, conformement à cette formule, des constantes du circuit; lorsque $R_e \to \infty$, A croît linéairement avec $\sqrt{\frac{L}{C}}$, et lorsque R_e acquiert une valeur finie, la résonance a lieu pour

$$\frac{L}{C} = R_L R_e.$$

Les calculs ci-dessus montrent que toute variation ΔC de la capacité du condensateur $C(= C_m + C_v)$, qui permettrait le rétablissement de la résonance au cas où le diélectrique entre les armatures du condensateur aurait des pertes, devra être attribué à la permittivité de ce diélectrique et non à sa conductivité.

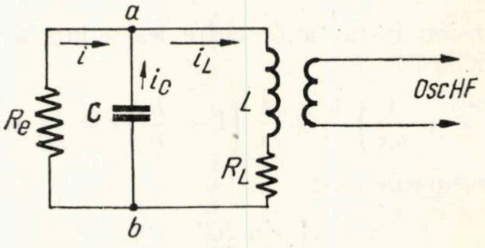

Fig. 4

4. MODE DE TRAVAIL

Une illustration aussi concluante que compléte des études expérimentales réalisable avec le type de résonateur décrit ci-dessus est fournie par le graphique qui représente la variation de la permittivité et de la conductivité électrique de l'air faiblement ionisé en fonction d'un champ magnétique extérieur homogéne et uniforme. Le schéma de l'installation est représentée par la figure 5.

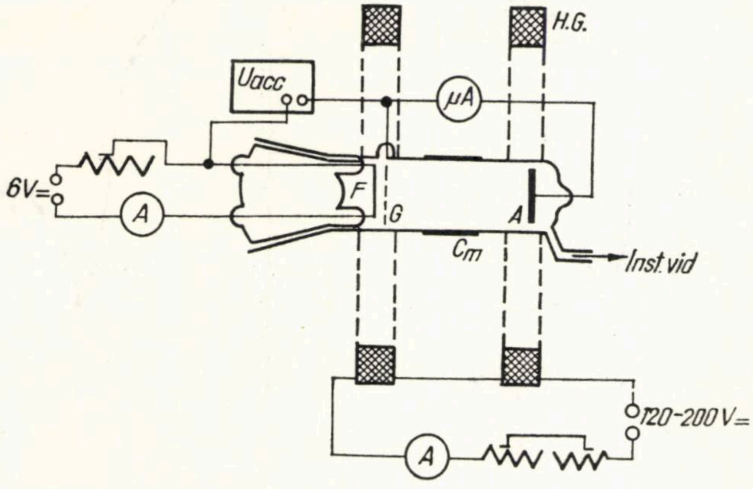

Fig. 5

Le gaz ionisé était obtenu dans la région grille accélératrice-anode d'un tube à décharge à cathode chaude. Le champ électrique dans la région grille- anode était annulé par suite de la connexion de l'anode à la grille accéleratrice à travers un microampèrmètre, qui mesurait, en même temps l'intensité du courant de décharge dans cette région (de même que dans le cas d'une triode en court-circuit). Cette région était située dans la partie centrale d'un ensemble de bobines de Helmholtz-Gauguin. Lorsque l'intensité du courant magnétisant était $I_B = 1$ A, l'induction avait la valeur $B = 59{,}6$ Gs.

A chaque valeur I_B la variation de la réactance du résonateur, due à la modification de la permittivité de l'air faiblement ionisé — se trouvant entre les armatures du condensateur de mesure —, était annulée par une variation correspondante de la capacité du condensateur variable C_v, qui mesure la variation $\Delta\varepsilon$ de la permittivité.

La figure 6 représente la variation ΔC_v — y compris la variation $\Delta\varepsilon$ — et la variation de la deviation du spot du galvanomètre — y compris celle de la conductivité du gaz ionisé — en fonction des valeurs croissantes de l'intensité du courant magnétisant I_B, à la fréquence de travail $f =$ $= 44$ MHz, dans les conditions paramétriques suivantes de la décharge $p = 1{,}28 . 10^{-2}$ Torr, $U_{acc} = 600$ V, $I_a/_{B=0} = 2$ μA.

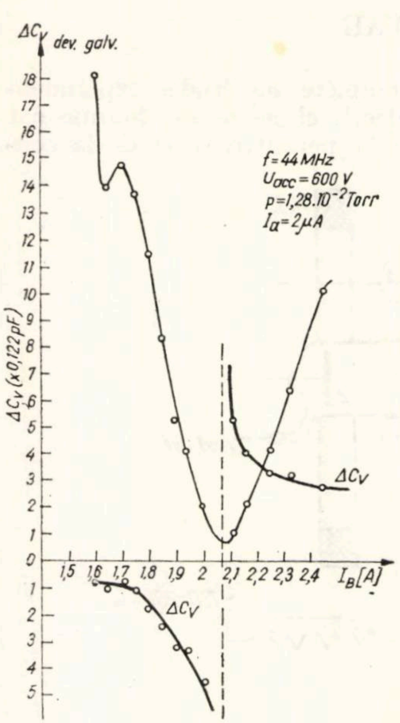

Fig. 6

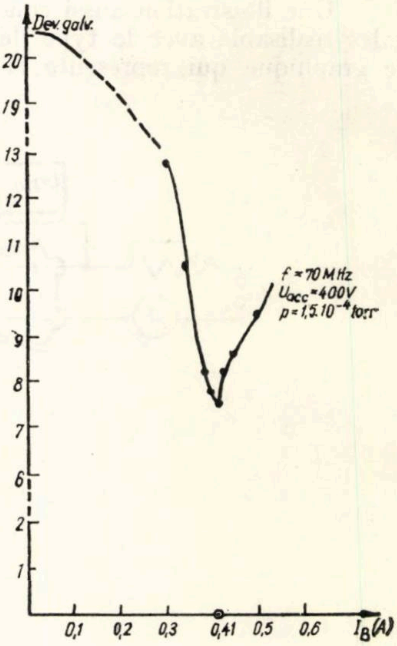

Fig. 7

5. CONCLUSIONS

Les valeurs obtenues pour le facteur de qualité Q du résonateur permettent d'apprecier que le circuit de mesure employé est capable de mettre en évidence des petites variations aussi bien de la permittivité du gaz ionisant, que de sa conductivité.

La construction de la courbe de variation de la conductivité d'un gaz ionisé en fonction de B, dans le cas des petites concentrations des porteurs de charge (des petites pressions), permet de mettre en évidence la résonance cyclotronique $\omega = \omega_c = \left(\frac{eB}{m_e}\right)$ des électrons libres du plasma d'une décharge à cathode chaude (fig. 7). En se servant de ces déterminations, on a pu établir, au moyen de cette installation, une méthode absolue pour l'étalonnage de certains types de bobines de Helmholtz-Gauguin [6].

⁂

L'auteur remercie le professeur Gheorghe Brătescu pour les indications qu'il lui a données pour la rédaction de cette note.

BIBLIOGRAFIE

1. E. V. Appleton, E. C. Childs, Phil. Mag. 10, 67 (1930)
2. Th. V. Ionescu. Rev. Roum. Phys. 1,16-22 (1956)
3. Th. V. Ionescu, Bull. de la Section Scientifique—Acad. Roumaine 28,5,273-309 (1945)
4. Th. D. Mantai Report SUIPR No. 194 (1967)
5. Gh. Brătescu, *Fizica Plasmei*, Ed. Didactică şi Pedag. (1970)
6. N. Gherbanovschi, Stud. Cercet. Fiz. 22,4 (1970)

ADMITTANCE MEASUREMENTES IN THE 1—200 MHz FREQUENCY BAND BY MEANS OF A CAPACITIVE BRIDGE

LIVIA MARIA IONESCU

INTRODUCTION

The admittance measurements in the 1—200 MHz frequency band constitutes a difficult problem, because the measuring lines do not allow easy accurate determinations, except around the value of their characteristic admittance. In the above mentioned frequency band, the classical bridges allow to determine admittances with either a positive susceptance, or a negative susceptance [1], being often necessary to use variable conductances, which is difficult to achieve in the high frequency domain.

Q-meters can also be used to determine impendances, but their chief inconvenient lies in the fact that the value of their resistive component has to be very high [2].

Another possibility consists in using comparators of the Thurston type [3] or the double turn comparator [4]. These also are difficult to make and their measuring domain is equally limited.

This is why I thought it useful to study a capacitive bridge, the schematic diagram of which is the same as that of the Siemens Rel 3R 21 bridge meant for the measurements effected whith the object of adapting the transmission lines [5].

Capacitance C_1 is fixed, $C_2 = C_3$, by construction, and C_4 is variable. We take $C_1 = (1/2)\, C_{4\,max}$.

The unknown admittance $Y = G + jB$ is represented by conductance G shunted by susceptance B. Conductance G_e serves as a standard, to which the conductance of the unknown admittance is to be compared. The susceptance is compensated by the variation of condenser C_4.

The equilibrium equation

$$Y_1\ Y_3 = Y_2 Y_4 \tag{1}$$

leads to the following expressions for G and B:

$$G = \frac{C_1}{C_2}\, G_e \tag{2}$$

$$B = (C_1 - C_4)\,\omega \tag{3}$$

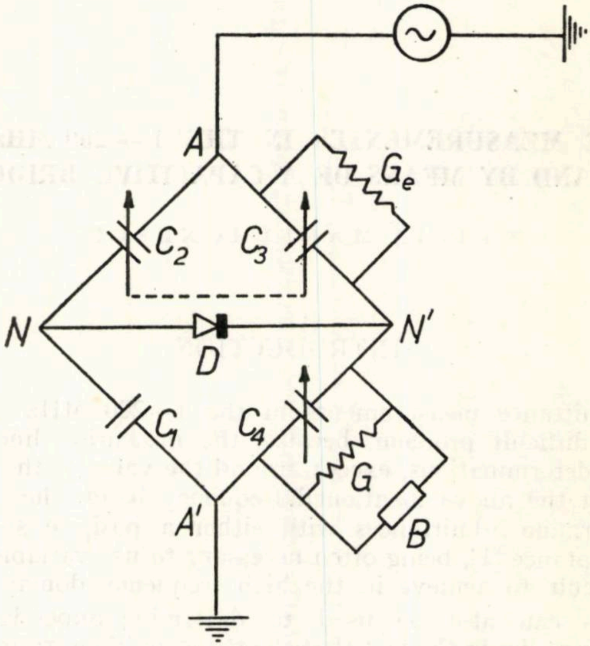

Fig. 1

Formulae (2) and (3) show that the bridge equilibrium does not depend on the frequency as regards the conductances, while, in case the susceptance is capacitive, the capacitance value is just equal to the $C_1 - C_4$ difference.

THE BRIDGE PRACTICAL REALIZATION

Although, on principle, this bridge is simple, its materialization raised some difficulties [5]. The values of the measured quantities were quite different from the correct ones.

The principal causes of the errors appearing in bridge measurements are the inductances of the connecting wires and the stray capacities [6], that give rise to stray couplings and to undesired resonance phenomena. In work [5], it was shown that, in order to obtain correct results, one has to take into account:

— to make sure of the geometrical symetry of the circuit;

— the reduction to a minimum of the connecting wires inductances and of the standard conductance;

— an accurate nowledge of capacitances C_1, C_2, C_3 and C_4 (fig. 1), as well as of the stray capacities;

— a proper screening of the detector and its satisfactory symmetrization at high frequencies, whith regard to the mass;

— a proper screening of the bridge as a whole, liable to bring about a considerable increase of the sensitivity as well.

An alternative of practical realization of this bridge is illustrated in figure 2 [7], where the notations of figure 1 are maintained. The bridge was used for studying phenomena appearing in cold plasma under the action of high frequency electromagnetic fields, with or without a uniform magnetic field [7], [8], [9], [10].

The bridge sensitivity proved to reach a maximum for $R_1 = R_2 = 10$ kΩ. Condensers $C_5 = C_6$, connected to the frame had 1200 pF each; they were constructed with mica plates as a dielectric medium. The construction of the bridge shows that the inductances of the connecting wires are completely eliminated. Only the residual inductances of the condensers

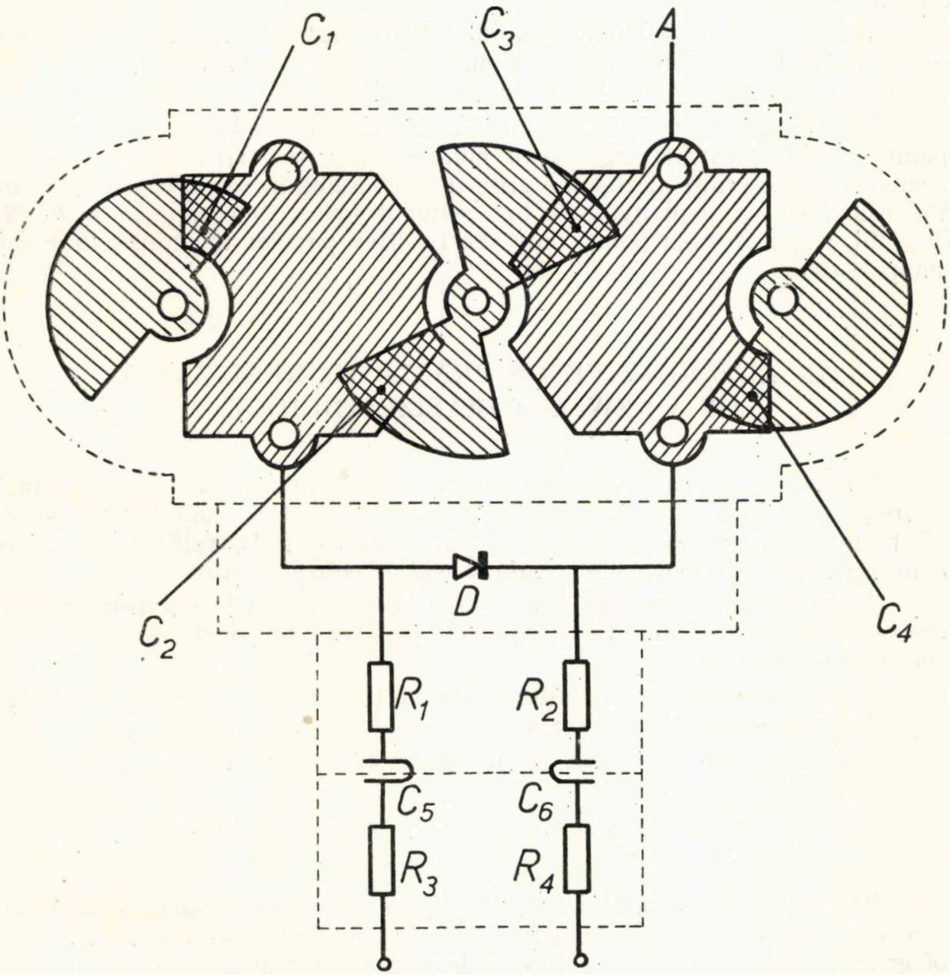

Fig. 2

remain, but they are quite negligible in the high frequency range for which the bridge is made.

The condenser stators are mounted on calit rods, a good insulating material in the high frequency range. The losses due to the leaking currents in the frame are thus practically eliminated.

The rotors of condensers C_1 and C_4 were electrically connected to the mass, through the agency of mobile contacts in the form of gripper-couplings. This system ensures the simultaneous existence of several contact points while removing the possibility of the appearance of contact resistances which could produce serious errors as well as instabilities when operating the installation.

Capacitances C_1, C_2, C_3 and C_4 are indicated in figure 2 by cross hatching areas.

The high frequency field is applied to the rotor in the form of a butterfly through a mobile contact similar to the above-mentioned ones. The screening is marked in figure 1 by dashed lines.

The bridge represented by figure 2 can be used for determinations point by point, by making use of non-inductive standard resistences connected between stator 2 and the gripper — coupling in electric contact with the rotor. It was equally used for semiautomatic determinations [7], [8], [9], [10], when, in each point, only the reactive part of the impedance was compensated.

AN ALTERNATIVE OF PRACTICAL REALIZATION OF A NEW AUTOMATIZED BRIDGE

For the conductivity study of ionized gases under the action of high — frequency fields, for the study of semi-conductors and for the study of high-frequency losses in the insulating materials, fully automatized determinations can be made within a wide frequency range.

This kind of determinations implies the automatic compensation of the reactive part, while the frequency or other physical parameters are continuously varied.

Figure 3 represents an alternative of the above — mentioned bridge, capable of effecting this operation.

The arrangement of the circuit geometry shows that

$$C_1 = \frac{C_1' + C_1''}{2} \qquad \text{and} \qquad C_4 = \frac{C_4' + C_4''}{2}\,.$$

The three rotors, axes of which are made of a good insulating material, can very easily execute a rotary motion, the mobile contacts in the form of gripper — couplings being now useless. Stators 2 and 3 are equally fastened by calit rods, while stators 1 and 4 are connected to the mass.

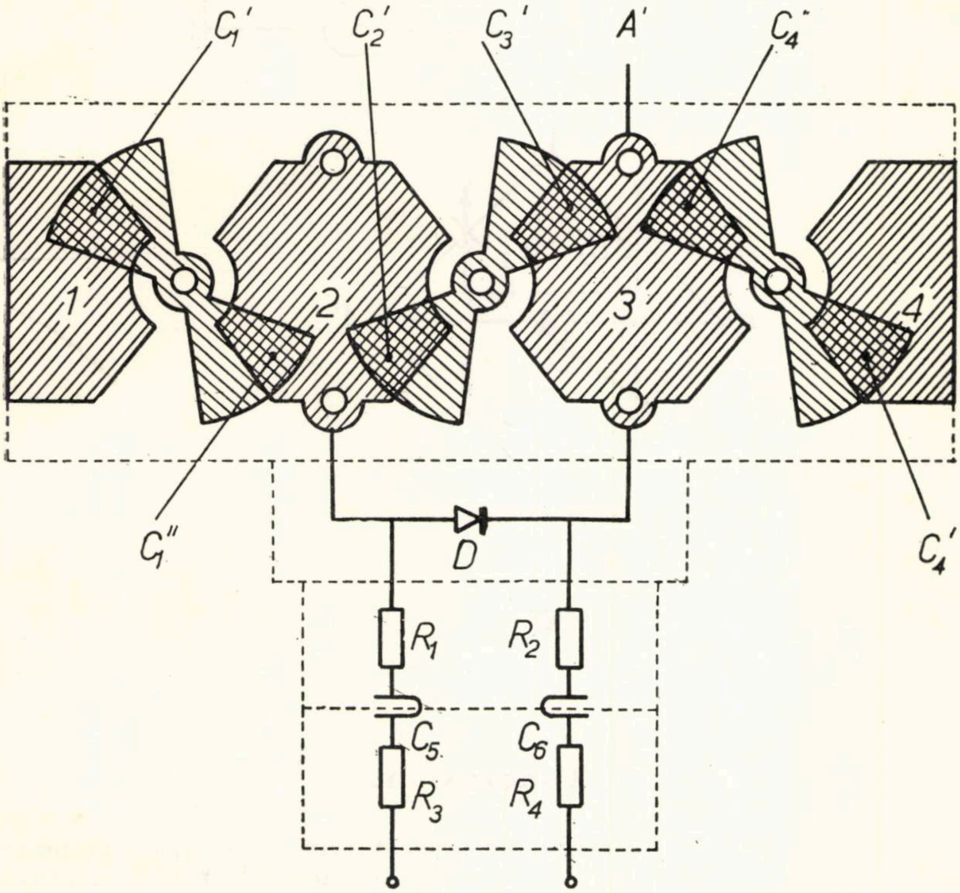

Fig. 3

The high-frequency field is applied to the bridge through the condenser C_5' (fig. 4). This condenser does not appear in figure 3, since its rotating plates prolong the ones that constitute capacitances C_2 and C_3, while its stator, fastened with the help of an insulating material, is in electric contact with the central wire of the coaxial line through which the high-frequency field is transmitted. When the axis of the central rotor moves, capacitance C_5' remains unchanged; this is possible because the rotor plates of this condenser have no more the form of a butterfly, but that of a disc, so that whatever the axis position, the area of the exposed surface is constant.

This bridge, the schematic diagram of which is given by figure 4, is equivalent to that in figure 1 (except the standard conductance G_e and the unknown conductance $Y = G + jB$).

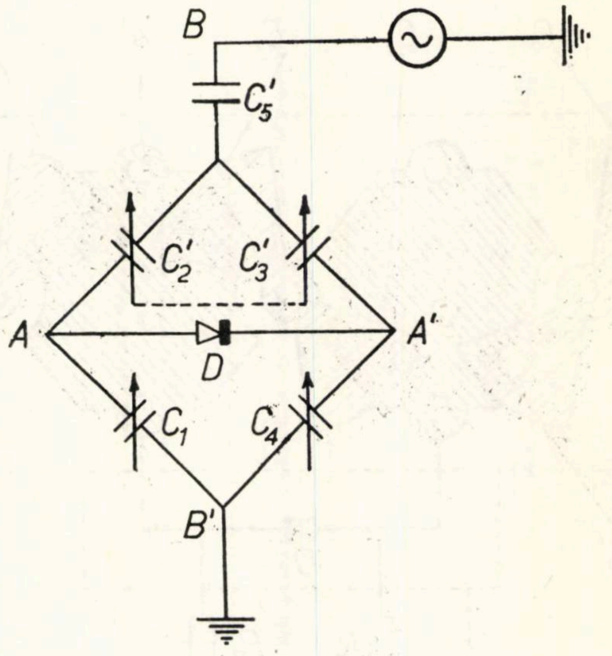

Fig. 4

Conclusions

The analysis of frequency independent type of a capacitive bridge led us to the conclusion that it is possible to effectively realize capacitive bridges in which the inductances of the connecting conductors can be practically eliminated.

The proposed bridge can be used for studying the ionized gases, the semi-conductors, as well as any quadripole.

In the newly proposed alternative of a bridge, it is no more necessary to have mobile contacts in the form of gripper-couplings, so that the rotors can very easily execute a rotary motion; as a consequence it can be used for completely automatized determinations.

REFERENCES

1. F. Gross, F. Aussenegg, Acta Physica Austriaca, 16, 2, 115 (1963).
2. Lothar Rohde, Gerhard Opitz, Hochfrequenztechnik und Elektro-Akustik 54, 54 116 (1939).
3. O. Franke, Nachrichtentechnik, 8, 290 (1964).

4. U. B. Bünh, O. Franke, Nachrichtentechnik, 8 294 (1964).
5. D. C. IONESCU, St. Cercet. Fiz. Bucureşti, 17, 629 (1965).
6. Keith Henney, Radio-Engineering Handbook, 35 Mc Grow-Hill Book Company, New York, p. 14 (1959).
7. Th. V. Ionescu. D. C. Ionescu, Rev. Roum. Phys., 12, 847 (1967).
8. Th. V. Ionescu, D. C. Ionescu, C. R. Acad. Sci. Paris, 267, 263 (1968).
9. Th. V. Ionescu, D. C. Ionescu, Rev. Roum. Phys., 14, 527 (1969).
10. D. C. Ionescu, Rev. Roum. Phys., 14, 919 (1969).

ON THE GENERALIZED COHERENCE FUNCTION

G. G. BRĂTESCU and T. TUDOR

Faculty of Physics — Bucharest University

Abstract

It is proved that the values of Fischer's correlation function defined in a certain system of reference are identical with the corresponding values of Wolf's correlation function defined in an appropriately chosen system of reference moving as related to the former, and, on this basis, is analysed the observability of the mutual coherence function.

1. THE CORRELATION FUNCTIONS AND THE GENERALIZED CORRELATION FUNCTIONS

The theory of partial coherence [1, 2] was worked out for the optical fields whose spectral structure is that determined directly by the source. The disturbances from two points of such a field, or the disturbances from the same point of it, taken retarded — for which the correlation is defined and analysed — have the same spectral structure. The correlation functions of Wolf kind:

$$\Gamma_{12}(\tau) = < V_1\left(t+\frac{\tau}{2}\right)\cdot V_2^*\left(t-\frac{\tau}{2}\right) > \tag{1}$$

were constructed taking into account such optical fields, „natural" in a sens, and cannot indicate the disturbances correlation but within such fields.

The coherence which can be described by help of Wolf functions is a coherence of identic frequencies.

Lately, especially in conection with the problem of light modulation there have come into attention optical fields with a particular spectral structure, an „artificial" one, namely of different coherent frequencies [4, 5]. There are several ways of getting such fields:

a) Doppler translation: the line resulted through it is coherent with the initial line [6].

b) The periodical modulation of light: the spectral line splits into a series of components coherent with one another [3, 4, 5].

c) If on a half-wave plate there falls circularly polarized light, at the exit of the plate it is obtained also circularly polarized light, but with the rotation sense of the electric vector opposite to that in the incident light. If the plate rotates (round a normal axis) with a frequency f in the sense of, or in the oposite sense of the circular polarization of the incident light, the light at exit is circularly polarized, with a diminished frequency, respectively increased, with f as compared to the frequency of the incident light. Such spectral translations may be achieved too by means of a wave plate or of Kerr effect with revolving field. Each time, the translated frequency is coherent with the initial line.

In any of the above mentioned cases, an interferencial device will make visible interference fringes (moving, this time), in this way pointing to the correlation of different frequencies, whereas Wolf's coherence function will not reveal this correlation. The schematical case of two strictly harmonical disturbances of different frequencies is eloquent for the limits of Wolf's function capacity to indicate the existence of the correlation:

$$\Gamma_{12}(\tau) = < e^{-i\left[2\pi\nu_1\left(t+\frac{\tau}{2}\right)+\Phi_1\right]} \cdot e^{i\left[2\pi\nu_2\left(t-\frac{\tau}{2}\right)+\Phi_2\right]} > =$$

$$= e^{-i\left[2\pi\frac{\nu_1+\nu_2}{2}\tau+\Phi_1-\Phi_2\right]} < e^{2\pi i(\nu_2-\nu_1)t} > = K \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T}\int_{-T}^{T} e^{2\pi i\Delta\nu\cdot t}\,\mathrm{d}t =$$

$$= K \lim_{T\to\infty} \frac{\sin 2\pi\Delta\nu\cdot T}{2\pi\Delta\nu\cdot T}$$

$$\Gamma_{12}(\tau) = 0 \tag{2}$$

although, obviously, the correlation exist, and namely it consists in the linear variation with the time of the phase difference of the two harmonical functions.

In 1967, F. Fischer generalized the mutual coherence function so that it might indicate as well the correlation of different frequencies, when this exist:

$$\Gamma_{12}(\sigma,\tau) = < V_1\left(t+\frac{\tau}{2}\right) V_2^{*}\left(t-\frac{\tau}{2}\right) e^{-2\pi i\sigma t} > \tag{3}$$

Coming back to the simple example of two harmonical disturbances of different frequencies ν_1 and ν_2,

$$\Gamma_{12}(\sigma,\tau) = < e^{-i\left[\pi\nu_1\left(t+\frac{\tau}{2}\right)+\Phi_1\right]} \cdot e^{i\left[2\pi\nu_2\left(t-\frac{\tau}{2}\right)+\Phi_2\right]} \cdot e^{-2\pi i\sigma t} > =$$

$$= e^{-i\left[2\pi\frac{\nu_1+\nu_2}{2}\tau+\Phi_1-\Phi_2\right]} \cdot < e^{-2\pi i[\sigma-(\nu_2-\nu_1)]\cdot t} > = K\cdot\lim_{T\to\infty}\frac{1}{2T}\int_{-T}^{T} e^{-2\pi i(\sigma-\Delta\upsilon)t}\,\mathrm{d}t =$$

$$= e^{-i\left[2\pi\frac{\nu_1+\nu_2}{2}\tau+\Phi_1-\Phi_2\right]} \cdot \delta(\sigma-\Delta\nu). \tag{4}$$

Fischer's (generalized) mutual coherence function indicate the existence of the correlation for a frequency difference $\sigma = \nu_2 - \nu_1$ and the lack of it for any other frequency difference.

The supplimentary factor $e^{-2\pi i\sigma t}$, introduced by Fischer, is a factor to explore the correlation. Specifically, in the case of two coherent quasi-monochromatic disturbances of different frequencies, ν_1, ν_2, for a value $\sigma = \nu_2 - \nu_1$, it compensates for the effect of frequency difference in the $V_1V_2^*$ product, within the correlation function (3), and thus allows this function to reveal the correlation, as the function (1) didid for identic coherent frequencies; for no other value can the compensation take place — the correlation exists for no other frequencies than ν_1 and ν_2.

Usually, the different coherent frequencies are obtained by division of energy and spectral translation from the same initial line. The factor $e^{-2\pi i\sigma t}$, for $\sigma = \nu_2 - \nu_1$, expresses a spectral translation equal to, and of a oposite sense to that which brought about the appearance of the different coherent frequencies.

2. A CONNECTION BETWEEN THE MUTUAL COHERENCE FUNCTION AND THE GENERALIZED MUTUAL COHERENCE FUNCTION

The correlation of different frequencies from two points of an optical field (or the self — correlation at a point) can be made obvious by the same kinds of phenomena which make evident the correlation of identic frequencies too, particularlly by interference. It is a fact signaled since long that the interference of two coherent different frequencies, for instance in a Young device, brings about moving interference fringes, or that moving interference fringes, can be interpreted as an effect of different coherent frequencies interference [5, 6, 7].

The moving interference fringes in a Young device can be made visible and by means of it, the coherence of different frequencies disturbances can be made obvious by placing the observer (the photographic plate) in a system moving together with the fringes. As Risco [7] pointed out, for a moving rectilinear fringe system arisen by the interference of two plane waves of different frequency in a given referential, there is an infinity of reference systems in which the fringes are in repause. In the concrete case of a Young device which, in the central region of the field, forms a system of parallel rectilinear fringes at first aproximation, such a referencial is, for instance, one which moves parallelly with the slit plane, in the direction and sense of the fringe movement, and at their speed. It is in this system that Fischer places the observer — a region of the photographic plate — when he applies the photographic plate on a disc revolving parallelly with the slit plane. Indeed, there will be a certain circumference on the disc on which the linear speed of its points will coincide with the speed of the fringes. If the photographic plate is obturated by another disc with a narrow sectorial slit, with its bisectrix parallel to the fringes, each region of the photographic plate will be impressed only while it is moving parallelly with the fringes, and lightly speaking, a narrow ring arround the speed coincidence circumference will be constitute the referential we mentioned above.

Let be ν_1 and ν_2 $(\nu_2 > \nu_1)$ the measured frequencies in a „fixed" (bound to Young device) system, for the quasi-monochromatic disturbances coming from P_1, respectivelly P_2. The frequencies measured for these disturbances in a system moving on a direction OX parallel with the slit plane and perpendicular on them, in the sense $P_2'P_1'$ (fig. 1) are:

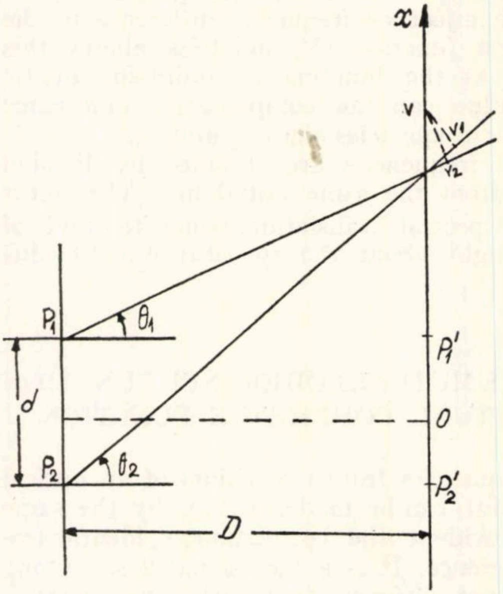

Fig. 1

$$\nu_{1M} = \nu_{1F} - \frac{v_1}{c}\,\nu_{1F} = \nu_{1F} - \frac{v\,x}{cD}\,\nu_{1F} + \frac{vd}{2cD}\,\nu_{1F}$$

$$\nu_{2M} = \nu_{2F} - \frac{v_2}{c}\,\nu_{2F} = \nu_{2F} - \frac{vx}{cD}\,\nu_{2F} - \frac{vd}{2cD}\,\nu_{2F} \tag{5}$$

where we took the sense $P_2'\,P_1'$ as the positive sense of speed and the trigonometrical sense as the positive sense of the angles made by the directions slit-observer P_1Q, P_2Q, and the normal to the slit plane. The origin of the position is the point O, situated on the perpendicular on the middle of the segment P_1P_2.

In a system moving together with the interference fringes, hence at the speed [5]

$$v = i\cdot\Delta\nu_F = \frac{\bar{\lambda}D}{d}\,\Delta\nu_F = \frac{c}{\bar{\nu}_F}\,\frac{D}{d}\,\Delta\nu_F \tag{6}$$

the measured frequencies are equal: $\nu_{2M} = \nu_{1M}$.
Indeed:

$$\nu_{1M} = \nu_{1F} - \frac{x}{d}\,\Delta\nu_F + \frac{1}{2}\,\Delta\nu_F = \bar{\nu}_F - \frac{x}{d}\,\Delta\nu_F \tag{7}$$

$$\nu_{2M} = \nu_{2F} - \frac{x}{d}\,\Delta\nu_F - \frac{1}{2}\,\Delta\nu_F = \bar{\nu}_F - \frac{x}{d}\,\Delta\nu_F.$$

Where we put:

$$\bar{\nu}_F = \frac{\nu_{2F} + \nu_{1F}}{2}, \qquad \Delta\nu_F = \nu_{2F} - \nu_{1F} > 0$$

the mean, respectively the difference of the two frequencies in the fixed system. We took into account: $\Delta\nu_F \ll \nu_F$.

The Doppler translations of the two frequencies are different. The compensation of the two frequencies difference by Doppler effect is achieved within a system bound to the moving fringes generated by these frequencies through interference. As one can observe from (7), this compensation is also accompanied by an equal translation of both frequencies, $-\frac{x}{d}\Delta\nu_F$, which depends on the position, x, of the observer. The compensation is achieved for $x < -\frac{d}{2}$ by a (unequal) increase of both frequencies, for $-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2}$ by a increase of frequency ν_1 and a diminution of frequency ν_2, and for $x > \frac{d}{2}$ by an (unequal)diminution of both frequencies. If $V_{1F}(t)$ and $V_{2F}(t)$ are the disturbances of the different frequencies ν_{1F} and ν_{2F} in the fixed system, coming from P_1 respectively P_2, the corresponding perturbation noticed in a system moving together with the fringes can be written as:

$$\begin{aligned} V_{1M}(t) &= V_{1F}(t)\cdot e^{-i2\pi\Delta\nu_1\cdot t} \\ V_{2M}(t) &= V_{2F}(t)\cdot e^{-i2\pi\Delta\nu_2\cdot t} \end{aligned} \tag{8}$$

where:

$$\begin{aligned} \Delta\nu_1 &= -\frac{x}{d}\Delta\nu_F + \frac{1}{2}\Delta\nu_F \\ \Delta\nu_2 &= -\frac{x}{d}\Delta\nu_F - \frac{1}{2}\Delta\nu_F \end{aligned} \tag{9}$$

so that:

$$V_{1M}\left(t+\frac{\tau}{2}\right)\cdot V^*_{2M}\left(t-\frac{\tau}{2}\right) \approx V_{1F}\left(t+\frac{\tau}{2}\right)\cdot V^*_{2F}\left(t-\frac{\tau}{2}\right)\cdot e^{-i2\pi\Delta\nu_F\cdot t} \tag{10}$$

The translation from the fixed system to that moving together with the fringes has as consequence the introduction of the compensation factor of frequency difference into the $V_1V_2^*$ product.

The coherence of the disturbances from the two point are interpreted differently by the observer situated in the fixed system, respectively by the observer which moves together with the fringes. For the first, the coherence is one of different frequencies, described by Fischer's function, and this coherence is manifested by moving interference. The observer which moves together with the fringes measure identic frequencies for the disturbances from the two points, so that he must expect to a Wolf sense correlation of the disturbances which generates the fringes.

From (10) it results that the values of the mutual coherence function of different frequencies (Fischer) defined in the fixed system coincide with the corresponding values of the mutual coherence function for identic frequencies (Wolf) defined in the moving system:

$$< V_{1M}\left(t+\frac{\tau}{2}\right)\cdot V^*_{2M}\left(t-\frac{\tau}{2}\right) > = < V_{1F}\left(t+\frac{\tau}{2}\right) V^*_{2F}\left(t-\frac{\tau}{2}\right)\cdot e^{-i2\pi\Delta\nu_F\cdot t} > \tag{11}$$

so that the measurement of Wolf functions in the moving system are implicitly measurements of Fischer functions defined in the fixed system. In particular, for instance, a measurement of fringe visibility, in the case of quasi-monochromatic light, in the moving system, supplies the degree of correlation defined Fischer in the fixed system, $|(\gamma_{12}(\sigma, \tau)|$, for the frequency difference $\sigma = \Delta\nu$ corresponding to the respective moving system.

BIBLIOGRAPHY

1. M. **Born**, E. **Wolf**, Principles of Optics, Pergamon Press 1959.
2. M. **Beran**, G. B. **Parrent**. Theory of Partial Coherence, Prentice Hall Inc. N. Y. 1964.
3. E. R. **Mustel**, N. **Parîghin**. Metodî moduliaţii i scanirovania sveta, Nauca, 1970.
4. P. **Connes**, **Duong Hong Tuan**, J. **Pinard**; J. **Phys**. Rad, t. 23, nr. 3 pg. 173, 1962.
5. F. **Fischer**; Z. . **Phys**. 199, pg. 541, 1967.
6. P. M. **Duffieux**; Rev., Opt. 33, pg. 376, 1957.
7. M. **Risco**; J. **Phys**. Rad. 13, pg. 441, 1952.

APLICAREA TEORIEI STATISTICE A LICHIDELOR ÎN ULTRAACUSTICA MOLECULARĂ

VASILE N. DIMA

1. INTRODUCERE

Nivelul cunoştinţelor actuale despre structura şi proprietăţile stări, lichide este mai redus faţă de cel referitor la starea gazoasă sau cristalinăi datorită particularităţilor structurale specifice ale lichidelor. Dacă pentru gaze sau solide se pot lua ca aproximaţii de ordinul zero, limită, (gazul ideal, cristalul ideal), pentru lichide nu e posibil acest lucru deoarece acestea conţin elemente din ambele stări extreme.

Datele experimentale oferite de diferitele mijloace de investigare a stării lichide (spectroscopie *X*, cu neutroni sau în infraroşu, *R M N*, *R E S*, ultrasunete etc), atestă existenţa în lichide atît a elementelor de ordine (cristaline), cît şi de dezordine (mişcări autodifuzive).

Cunoaşterea stării lichide se face pe 2 căi paralele care se completează şi se sprijină reciproc: cu ajutorul reprezentărilor modeliere, sau pe calea riguroasă a teoriei stastistice. Modelele nu pot descrie comportarea diversă a lichidelor pe întreg intervalul de temperatură cuprins între punctul de topire şi cel de fierbere. Ele reflectă just realitatea stării lichide doar pe plan local, pentru o anumită categorie de lichide şi într-un interval mic de temperatură.

În ultimii 20 de ani teoria statistică a stării lichide a făcut paşi decisivi înainte şi se poate spune că bazele acestei importante ramuri a fizicii au fost puse. Folosind mecanizmul funcţiilor de corelaţie, teoria statistică dă relaţii generale pentru toate mărimile termodinamice cu care operează fizica şi ultraacustica moleculară. Pornind de la un model general al unei stări condensate de particole care interacţionează după un anumit potenţial, teoria statistică descrie satisfăcător comportarea lichidului pentru intervale largi de temperatură şi presiune.

2. FUNCŢII DE CORELAŢIE

În locul calculului integralei statistice sau de configuraţie ale întregului sistem considerat, formalismul funcţiilor de corelaţie are în vedere probabilitatea realizării configuraţiilor unor grupe de 1, 2, 3,... particole, oferind atît informații globale despre structura și proprietățile sistemului (ca și cele ce se obține prin calculul integralei statistice), cît și date directe despre dispunerea reciprocă a grupelor de particole considerate. Metoda funcțiilor de corelație a fost creeată și dezvoltată de Kirkwood [1, 2, 3], Born și Green [4, 5], și Bogoliubov [6].

Considerăm dintr-un sistem de N particole identice în interacție o grupă arbitrară formată din $s = 1, 2, 3, \ldots$ particole. Fie $\mathrm{d}w(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \ldots, \vec{q}_s)$ probabilitatea găsirii grupei considerate în elementele infinitesimale de volum $\mathrm{d}\vec{q}_1, \mathrm{d}\vec{q}_2, \ldots, \mathrm{d}\vec{q}_s$ din jurul punctelor $\vec{q}_1, \vec{q}_2, \ldots \vec{q}_s$.

Funcțiile de corelație $F_s(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \ldots, \vec{q}_s)$ se definesc prin relația

$$\mathrm{d}w\,(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \ldots, \vec{q}_s) = \frac{1}{V^s} F_s(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \ldots \vec{q}_s)\, \mathrm{d}\vec{q}_1\, \mathrm{d}\vec{q}_2 \ldots \mathrm{d}\vec{q}_s \tag{1}$$

Astfel definite, funcțiile de corelație sînt mărimi adimensionale. Probabilitatea ca cele s particole să se afle în întreg volumul V este evident egală cu unitatea (condiția de normare) și deci

$$1 = \frac{1}{V^s}\int_V \ldots \int_V F_s\,(\vec{q}^3, \vec{q}_2, \ldots, \vec{q}_s)\, \mathrm{d}\vec{q}_1\, \mathrm{d}\vec{q}_2, \ldots, \mathrm{d}\vec{q}_s. \tag{2}$$

Pentru o singură particolă condiția de normare se scrie

$$1 = \frac{1}{V}\int_V F_1\,(\vec{q})\,\mathrm{d}\vec{q},$$

ceea ce înseamnă

$$F_1\,(\vec{q}) = 1. \tag{3}$$

Relația pentru funcțiile de corelație de diferite ordine, așa cum rezultă din definiție este

$$F_p\,(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \ldots, \vec{q}_p) = \frac{1}{V^{s-p}}\int_V \ldots \int_V F_s\,(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \ldots, \vec{q}_s)\, \mathrm{d}\vec{q}_{p+1} \ldots \mathrm{d}\vec{q}_s \tag{4}$$

Funcțiile de corelație sînt simetrice față de argumentele lor. Acest lucru pentru 2 particole se scrie astfel

$$F_2(\vec{q}_1, \vec{q}_2) = F_2(\vec{q}_2, \vec{q}_1). \tag{5}$$

Funcțiile de corelație pot fi legate de integrala de configurație a sistemului folosind distribuția Gibbs referitoare la coordonatele celor N particole [7, cap. II]

$$\mathrm{d}w\,(\vec{q}_1, \ldots, \vec{q}_N) = \frac{1}{Q_N}\exp\left[-\frac{U_N\,(\vec{q}_1, \ldots, \vec{q}_N)}{KT}\right] \tag{6}$$

unde U_N este energia potențială de interacție iar Q_N constanta de normare

Conform relațiilor (1) și (6), funcțiile de corelație referitoare la toate particolele se scriu

$$F_N(\vec{q}_1, \ldots, \vec{q}_N) = \frac{V^N}{Q_N} \exp\left[-\frac{U_N(\vec{q}_1, \ldots, \vec{q}_N)}{KT} \right]. \tag{7}$$

Aceste funcții pot fi, în principiu, calculate cu această relație. Practic acest lucru nu e posibil deoarece pentru sisteme reale (in interacție) nu se pot calcula mărimile U_N și Q_N din cauza necunoașterii exacte a potențialului de interacție dintre 2 particole. Doar în cazuri particulare, folosind dezvoltări în serie după puterile densității, se pot prelungi calculele pînă în faze finale. Pentru construirea sistemului funcțiilor de corelație se urmează calea rezolvării ecuațiilor integro-diferențiale pe care acestea le verifică.

3. FUNCȚII RADIALE DE DISTRIBUȚIE

Considerăm un sistem lichid omogen în echilibru termodinamic. În acest caz distribuția perechilor de particole din sistem nu va depinde de orientarea lor reciprocă, ci numai de distanța dintre ele, astfel încît

$$F_N(\vec{q}_1, \vec{q}_2) = g(|\vec{q}_1 - \vec{q}_2|) = g(r) \tag{8}$$

Funcția binară de corelație $g(r)$ se mai numește și funcție radială de distribuție. Cunoașterea funcției $g(r)$ este de o deosebită importanță, deoarece toate mărimile termodinamice precum și cele ultraacustice (viteza și absorbția ultrasunetelor), se exprimă prin această funcție.

Expresiile pentru energia internă, presiune și compresibilitate izotermă se deduc ușor în teoria statistică a lichidelor.

$$E = \frac{3}{2} NKT + \frac{2\pi N}{v} \int_0^\infty \Phi(r)\, g(r)\, r^3\, \mathrm{d}r \tag{9}$$

$$p = \frac{KT}{v} - \frac{2}{3v^2} \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}\Phi(r)}{dr}\, g(r)\, r^3\, \mathrm{d}r \tag{10}$$

$$\beta_T = \frac{v}{KT} + \frac{4\pi}{KT} \int_0^\infty (g(r) - 1)\, r^2\, \mathrm{d}r \tag{11}$$

unde $v = \frac{V}{N}$, $\Phi(r)$ potențialul de interacție între 2 particole.

Teoria statistică a lichidelor în faza actuală a dezvoltării sale, lucrează în aproximația de superpoziție, introdusă de către Kirkwood, aproximație care exprimă funcția ternară de corelație prin funcțiile binare

$$F_3(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3) = g(|\vec{q}_1 - \vec{q}_2|)\, g(|\vec{q}_1 - \vec{q}_3|)\, g(|\vec{q}_2 - \vec{q}_3|) \tag{12}$$

Folosind această aproximație pentru un lichid omogen, teoria statistică ajunge la următoarea ecuație integrală pentru funcția radială de distribuție

$$KT \ln g(r) + \Phi(r) + \frac{2\pi}{v} \int_0^\infty (g(\rho) - 1) \left\{ \int_{|r-\rho|}^{r+\rho} \left[\int_0^t \frac{\mathrm{d}\Phi(x)}{\mathrm{d}x}\, g(x)\, \mathrm{d}x \right] t\, \mathrm{d}t \right\} \rho\, \mathrm{d}\rho = 0 \tag{13}$$

Integrarea ecuației (13) pentru $g(r)$ este practic imposibilă cu mijloace obișnuite din cauza puternicei sale neliniarități, funcția $g(r)$ fiind conținută atît sub semnul logaritmului, cît și în nucleul integralei.

Integrarea ecuației (13) s-a dovedit a fi posibilă doar printr-un calcul numeric folosind calculatoare electronice rapide.

Kirkwood și colaboratorii săi [8, 9] au integrat numeric ecuația (13) folosind un calculator I.B.M. Au folosit potențialul Lennard-Jones pentru descrierea interacțiilor interparticole

$$\begin{cases} \Phi(r) = +\infty, & r < a \\ \Phi(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{a}{r}\right)^{12} - \left(\frac{a}{r}\right)^{6}\right], & r > a \end{cases} \tag{14}$$

unde ε este energia gropii de potențial, iar a distanța asociată acestei energii. Potențialul (14) descrie corect interacțiile binare pentru molecule nepolare, sferice sau cu simetrie sferică. Exponentul primului termen (repulsiv) este oarecum nesigur, în sensul că, așa cum arată experiența, poate lua în afara valorii 12 și valorile 10, 11.

Pentru integrare Kirkoood introduce funcția

$$\psi(r) = r \ln g(r) \tag{15}$$

pe care o dezvoltă după puterile lui $\frac{\varepsilon}{KT}$ în felul următor

$$\psi(r) = \psi_0(r) + \frac{\varepsilon}{KT}\psi_1(r) + \left(\frac{\varepsilon}{KT}\right)^2 \psi_2(r) + \ldots \tag{16}$$

Integrarea a fost făcută mai întîi pentru obținerea funcției $\psi(r)$, (aproximația zero), apoi pentru aproximațiile de ordinul I, $\psi^3(r)$ și II, $\psi_2(r)$. Nu s-au calculat aproximații de ordin superior, acestea situîndu-se sub limita erorilor experimentale.

Folosind (14) și (15) și cunoscînd funcțiile $\psi(r)$, $k = 0, 1, 2$, funcția radială de distribuție se calculează cu relația

$$g(r) = \exp\left\{\frac{1}{r}\left[(\psi_0(r) + \frac{\varepsilon}{KT}\psi_1(r) + \left(\frac{\varepsilon}{KT}\right)^2 \psi_2(r)\right]\right\} \tag{17}$$

În ecuația (13) pentru $g(r)$ intră, în afara temperaturii și densitatea prin intermediul lui v, astfel încît

$$g = g(r;\ T, \rho) \tag{18}$$

Rezultatele integrării numerice sînt prezentate sub formă de tabele și grafice, nu sub formă analitică. Aflarea formei matematice a funcției se face tot cu ajutorul calculatorului electronic folosind valorile numerice tabelate.

Funcția $g(r)$ obținută sub formă analitică în ultimă instanță, este folosită în continuare pentru calculul mărimilor termodinamice sau al celor din ultraacustica moleculară.

4. VITEZA DE PROPAGARE A ULTRASUNETELOR ÎN LICHIDE

Considerînd lichidul omogen ca un mediu continuu, se obţine pentru viteza de propagare a ultrasunetelor expresia cunoscută

$$c = \left(\frac{C_p}{\rho C_v} \cdot \frac{1}{\beta_T}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{19}$$

unde C_p şi C_v sînt căldurile specifice la presiune şi respectiv volum constante, ρ densitatea, iar $\beta_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$, compresibilitatea izotermă. Primele 3 mărimi pot fi luate din măsurătorile altor experienţe. În ceea ce priveşte β_T, aceasta se poate calcula riguros cu relaţia (11) dacă se cunoaşte funcţia $g(r)$. După aflarea compresibilităţii folosind (19) se poate calcula viteza c. Pe de altă parte viteza se poate obţine direct şi cu o bună precizie din măsurători ultraacustice. Valorile obţinute teoretic se pot compara cu cele experimentale, realizîndu-se în acest fel posibilitatea verificării experimentale a teoriei statistice.

In integrarea făcută de Kirkwood, g depinde de densitate prin intermediul funcţiilor ψ_K. Acestea au fost integrate pentru 6 valori distincte ale densităţii. Funcţia g depinde şi de natura lichidului studiat prin intermediul mărimilor ε şi a care pot fi luate din măsurători de vîscozitate, sau din al doilea coeficient virial.

Temperatura intervine în g conform relaţiei (17). Pentru o substanţă dată (de exemplu pentan: $\frac{\varepsilon}{K} = 345$ grd, $a = 5{,}769$ Å), se calculează $g(r)$ la o densitate şi temperatură fixate. Se obţine sub formă de mulţime tabelată $g(r)$ corespunzătoare unui spectru de 32 de valori ale lui r. Pentru o aceeaşi substanţă, aceeaşi densitate, dar altă temperatură, se calculează din nou $g(r)$ pînă este parcurs întreg intervalul de temperatură propus. Se repetă apoi calculele pentru aceeaşi substanţă, o altă densitate şi aceeaşi serie de valori ale temperaturii. Pentru o singură substanţă (6 valori ale densităţii şi 20 ale temperaturii) trebuie să se efectueze $6 \times 20 = 120$ calcule. Pentru o serie de 5 substanţe trebuiesc efectuate $5 \times 120 = 600$ calcule, ceea ce înseamnă 600 funcţii $g(r)$. Este clar că aceste calcule nu pot fi făcute decît cu ajutorul calculatorului electronic.

Conform datelor experimentale obţinute din măsurători de difracţie cu raxa X, neutroni etc, $g(r)$ se prezintă ca o funcţie periodică amortizată de forma

$$g(r) = 1 + Ae^{-|B|r} \cos (Cr + D) \tag{20}$$

Admiţînd o astfel de formă pentru g, prin metode grafice cu ajutorul calculatorului dotat cu un ploter special, se determină coeficienţii A, B, C şi D, deci forma analitică a funcţiei radiale de distribuţie. Abia acum poate începe efectuarea propriu zisă a calculelor de determinare a compresibilităţii izoterme şi apoi a vitezei. Bineînţeles că şi aceste calcule se pot face tot cu ajutorul calculatorului electronic.

6. ABSORBŢIA ULTRASUNETELOR ÎN LICHIDE

Absorbţia ultrasunetelor este determinată de 2 grupe mari de mecanizme:

— datorită forţelor de frecare internă, conductibilităţii sau radiaţiei termice. Acest mecanizm se mai numeşte relaxare termică.

— datorită proceselor de relaxare.

Ultraacustica moleculară, prin teoria lui Stokes-Kirchhoff, dă un bun acord cu experienţa în ceea ce priveşte partea termică („clasică") a absorbţiei, prin care se ia în considerare numai vîscozitatea dinamică (asociată tensiunilor tangenţiale de frecare internă).

Absorbţia totală obţinută experimental depăşeşte, (uneori de sute de ori), valoarea calculată prin teoria Stokes-Kirchhoff. Absorbţia suplimentară este pusă pe seama vîscozităţii volumice (asociată tensiunilor normale).

În sensul explicării absorbţiei superstokes, teoria statistică a lichidelor, folosind funcţiile radiale de distribuţie, găseşte relaţii pentru vîscozitatea de volum η_2. Kirkwood obţine următoarea relaţie pentru η_2, [11]:

$$\eta_2 = \frac{\pi}{9D}\left(\frac{N}{V}\right)^2 \int_0^\infty \frac{d\Phi(r)}{dr} g(r)\, \varphi(r)\, r^3\, dr \tag{21}$$

unde D este coeficientul de autodifuzie, iar $\varphi(r)$ o funcţie ce verifică anumite ecuaţii diferenţiale.

Relaţia (21) dă posibilitatea calculării vîscozităţii volumice dacă se cunoaşte $g(r)$ şi potenţialul de interacţie. Valoarea calculată se poate compara apoi cu cea obţinută din măsurători de absorbţie ultrasonoră, (componenta superstokes) [10], dată de relaţia

$$\eta_2 = \frac{2\rho c^3}{\omega^2}\alpha_2 \tag{22}$$

Teoria statistică a lichidelor oferă relaţii de calcul şi pentru alte mărimi din ultraacustica moleculară: vîscozitatea dinamică η_1, modulul dinamic şi modulul adiabatic de compresibilitate, timpii de relaxare asociaţi, etc. Aceste relaţii nu se mai dau aici. Articolul de faţă a fost conceput pentru a indica un drum posibil de verificare experimentală a teoriei statistice, folosind date experimentale ultraacustices şi pentru obţinerea de date noi despre starea lichidă.

BIBLIOGRAFIE

1. J. Kirkwood, J. Chem. Phys. 7, 919, 1935.
2. J. Kirkwood, E. Boggs, J. Chem. Phys. 10, 394, 1942.
3. J. Kirkwood, E. Monroe, J. Chem. Phys 9, 514, 1941.
4. M. Born, H. Green, Proc. Roy. Soc. A 188, 10, 1946.
5. M. Born, H. Green, Proc. Roy. Soc. A 189, 455, 1947
6. N. N. Bogoliubov, Problemî dinamiceskoi teorii v statisticeskoi fizike, Gostehizdat, 1946.
7. I. Z. Fişer, Statisticeskaia teoria jidkostei, GIFML, Moscova, 1961.
8. J. Kirkwood, E. Mann, B. Adler, J. Chem. Phys. 18, 1040, 1950.
9. J. Kirkwood, V. Lovinson, B. Adler, J. Chem. Phys. 20, 929, 1952.
10. I. Mihailov, V. Soloviev, Iu. Sîrnilov, Osnovî molekuliarnoi akustiki, Ed. Nauka, Moscova, 1964.
11. J. Kirkwood, F. Buff, M. Green, J. Chem. Phys. 17, 988, 1949.

ПРИМЕНЕНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ЖИДКОСТЕЙ В МОЛЕКУЛЯРНОЙ УЛЬТРААКУСТИКЕ

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ

В данной работе излогается применение статической теории жидкостей в молекулярной ультраакустике. Показанны способ получения радиальных функции распределения для однородных жидкостей, а также выражения для расчёта скорости и поглощения ультразвуков в жидкостях, основан на радиальных функции распределения.

THE APPLICATION OF THE STATISTIC THEORY OF LIQUIDS ÎN THE MOLECULAR ACCOUSTICS

ABSTRACT

In the paper is presented a possibility of application of the statistic theory of the liquids in the molecular ultraaccoustics.

The way of obtaing the radial distribution functions for homogenous liquids is shown as well as the expressions for calculating the velocity and absorbtion coefficient of the ultrasons in the liquids, using the radial distribution functions.

CONSIDÉRATIONS CONCERNANT LA PROPAGATION DES ULTRASONS DANS DES SOLIDES ÉLASTIQUES POLYCRISTALLINS

VASILE P. MIHU et LEON ST. STAICU

RÉSUMÉ

On présent les expériences des auteurs pour mettre en évidence les particularités de la propagation des ultrasons de 2 et 4 MHz, dans certains aciers au carbone. Les résultats sont comparés avec les valeurs théoriques et celles trouvées par d'autres chercheurs.

On peut dire que ces expériences constituent de nouvelles possibilités d'investigation de la structure des corps solides.

I. INTRODUCTION

Des considérations théoriques montrent que, pendant la propagation des ultrasons dans des solides à structure cristalline, on constate une atténuation essentiellement dûe à la diffusion des ondes, parce qu'il y a des zones dans ces materiaux (des cristaux et des groupes de cristaux) avec de grandes variations des propriétés élastiques et de la densité. Il n'existe pas encore de théorie quantitative décrivant le phénomène d'atténuation des ondes ultrasoniques à cause du caractère complèxe de la structure fine des corps solides élastiquement hétérogènes. Toutefois, pour le cas particulier $\lambda > \overline{D}$(λ = la longueur d'onde, $\overline{D}$ = la dimension linéaire moyenne des cristallites dans le milieu), des résultats intéressants ont été obtenus par les physiciens soviétiques I. M. Lifșiț et G. D. Parhomovski, ainsi que par les américains W. P. Mason et Mc. Skimin [2]. La théorie de Lifșiț et Parhomovski est basée sur l'hypothèse d'une petite anisotropie élastique des cristaux du métal et calcule l'atténuation en résolvant les équations tensorielles qui décrivent la propagation des ultrasons dans le milieu polycristallin. Les expressions obtenues pour le coefficient d'atténuation par diffusion se présentent sous la forme d'une somme de deux membres, ce qui démontre que, par la diffusion des ondes longitudinales, une partie du faisceau ultrasonique est transformée en ondes transversales, et, inversement, les ondes transversales sont transformées en ondes longitudinales.

Mason et Mc. Skimin ont élaboré leur théorie en admettant l'analogie de la diffusion des ondes élastique sur des grains cristallins, avec celle des ondes électromagnétiques dans des milieux troubles (la diffusion de la lumière, de type Rayleigh). Cette analogie n'est pas tout à fait justifiée concernant le sens physique, parce que, dans le problème de Rayleigh $e/\delta = 100$, où e = la distance entre les centres diffusants, et δ = la dimension moyenne des particules diffusantes. D'autre part, dans les solides polycristallins, les éléments diffusants (les grains cristallins) sont étroitement liés entre eux, et la déviation en égard à la condition de Rayleigh, est évidente.

Quoique les valeurs numériques des coefficients d'atténuation, calculées par ces deux théories, présentent quelquefois des différences de valeurs jusqu'à 30 fois, l'analyse des résultats obtenus théoriquement par les chercheurs soviétiques et américains, démontre qu'il est possible d'en tirer quelques conclusions qualitatives certaines:

— l'atténuation des ondes ultrasoniques augmente rapidement en même temps que la fréquence et les dimensions des éléments structuraux;

— l'atténuation augmente à mesure que le milieu devient plus élastiquement anisotrope.

Ces conclusions sont exprimées par la loi de la diffusion de Rayleigh, comme suit (α étant le coefficient d'atténnation):

$$\alpha \sim D^3 . f^4 \qquad (1)$$

pour $\lambda > 2\pi D$, d'après Lifșiț et Parhomovski;

pour $\lambda > 3D$, d'après Mason et Mc. Skimin.

La vérification expérimentalle de la théorie ne peut donner de meilleurs résultats parce que les relations théoriques du calcul sont approximatives, le nombre de dates expérimentales est réduit, et les valeurs d'atténuation ultrasonique mesurées, dans des solides, doivent être corrigées en ce qui concerne: la courbure du front d'onde, les diverses pertes provoquées par la divergence, la réflexion et la diffraction des ultrasons, par les effets de la géométrie de l'expérience, etc.

2. MOD DE TRAVAIL

Le but de cet ouvrage est d'obtenir quelques dates expérimentales concernant la propagation des ultrasons dans des aciers et de faire la comparaison avec les résultats des théories existantes, pour approfondir les recherches dans ce domaine et pour établir enfin une nouvelle méthode d'étude de la structure des métaux.

Les expériences des auteurs ont suivit la variation d'atténuation des ultrasons en fonction des modifications structurales produites par le traitement thermique des quelques aciers au carbone dont la composition chimique et le traitement thermique sont indiquées dans les tableaux 1 et 2.

Tableau 1

Composition chimique des aciers étudiés

Acier	Composition chimiquie, %							
	C	Mn	Si	P	S	Al	TI	V
PD	0,12	1,22	0,53	0,029	0,018	0,043	—	0,06
OL 52	0,23	1,43	0,31	0,040	0,012	0,060	0,060	—
OL 37	0,17	0,63	0,25	0,021	0,032	0,021	—	—

Tableau 2

Traitement thermique des aciers étudiés

Acier	Traitement thermique			
	Recuit	Normalisé	Trempé	Trempé et revenu
PD *OL* 52 *OL* 37	700°C 120 min réfroidissement dans le four.	900°C 30 min. réfroidissement dans l'aire.	900°C 30 min. réfroidissement dans l'eau	900°C, 30 min. réfroidissement dans l'eau. 600°C, 90 min. réfroidissement dans l'aire.

Les mesures d'atténuation des ultrasons sont effectuées par la méthode de la réflexion des impulsions à des fréquences de 2 et 4 MHz, utilisant des piézocristaux de titanate de baryum, respectivement, de quartz, avec le diamètre de 24 mm. Pour obtenir des résultats corrects, les éprouvettes doivent ètre soigneusement usinées:

— il faut que les éprouvettes soient cylindriques ou parallélipipédiques, avec un diamètre ou une dimension transversale cinq fois plus grande que la longueur d'onde des ultrasons (à la fréquence de 2 MHz la longueur d'onde dans l'acier est de 2,9 mm), pour éviter les réflexions sur les surfaces latérales de l'éprouvette;

— les surfaces frontales sur lesquells a lieu la réflexion doivent être finement usinées, paralléles entre elles et normales à la direction de propagation du faisceau ultrasonique.

Si on ne réalise pas ces conditions, l'écran oscillographique présentera des images d'interférence et la précision de la mesure du coefficient d'atténuation sera faible. L'interférence entre les divers types des ondes dans l'éprouvette, qui joue le rôle de guide d'onde, fait que la courbe décrite sur l'écran par les sommets des impulsions succesifs, n'a pas d'allure exponentielle et ne correspond pas à la loi donnée par (2). On a utilisé ici des éprouvettes cylindriques ⌀ 35 mm, et 250 mm de longueur, à faces frontales paralléles avec une tolérance de 0,02 mm pour la longueur de l'éprouvette

Le calcul des coefficients d'atténuation a été fait par la formule générale:

$$I = I_0 \cdot e^{-2\alpha L} \qquad (2)$$

d'où résulte:

$$\alpha_{dB/cm} = \frac{20}{2L} \log \frac{H_n}{H_{n+1}} \tag{3}$$

où: α = le coefficient d'atténuation;
I_o, I = l'intensité initiale, finale;
H_n, H_{n+1} = la hauteur sur l'écran d'impulsion d'ordre n, respectivement, n + 1;
L = la longueur de l'éprouvette, cm.

Pour augmenter la précision de la détermination, on a employé plusieurs couples d'impulsions dans le calcul de α. Il ne faut pas prendre plus de trois couples, parce que, si le nombre n augmente, la hauteur d'impulsions baisse et, par conséquence, l'érreur de la mesure du rapport H_n/H_{n+1} s'accroit, étant évalué dans ces conditions a environ 3%, c'est-à-dire 10% pour les valeurs α.

3. RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX

On présent dans les tableaux 3.a. et 3.b., les valeurs des coefficients d'atténuation à la fréquence de 2 MHz et 4 MHz.

Tableau 3.a.

Acier	$\alpha_{dB/cm}$			
	Recuit	Normalisé	Trempé	Trempé et revenu
PD	0,38	0,31	0,33	0,27
OL 52	0,49	0,34	0,34	0,26
OL 37	0,69	0,62	0,34	0,29

Tableau 3.b.

Acier	$\alpha_{dB/cm}$			
	Recuit	Normalisé	Trempé	Trempé et revenu
PD	0,55	0,48	0,34	0,29
OL 52	0,90	0,50	0,39	0,30
OL 37	1,13	0,94	0,41	0,37

Afin d'illustrer les résultats et de vérifier l'éxactitude des conditions expérimentalles, on présent dans les fig. 1 ... 5 les images obtenues pour l'acier *OL* 37, à deux fréquences, et soumis à différents traitements thermiques.

Ces résultats doivent être corrigés en tenant compte aussi des phénomènes supplémentaires, que nous avons auparavant souligné, et qui contribuent à des pertes ultrasoniques dans les solides. Simmons et Urick [5] ont considéré l'émission des ultrasons d'un piézocristal comme étant celle d'un piston circulaire travaillant dans un fluide et ont trouvé que la pression acoustique moyenne, mesurée sur le récepteur, est pratiquement constante jusqu'à une distance égale au double de la distance entre la source et le dernier maximum de la pression axiale. Par voie expérimentale, ils ont demontré que le domaine des ondes planes, pour l'émission ultrasonique dans le milieu solide, est étendu jusqu'à la distance $d = 2 \,.\, a^2/\lambda$ (a = la rayon du piston ou du piézocristal), c'est-à-dire, pour nous $d_2 = 100$ mm, et $\mathrm{d}_4 = 200$ mm, à des fréquences de 2 et 4 MHz. Plus loin de la source ultrasonique, le cas $r > > a$, la pression acoustique n'est pas axiale, notamment:

$$p\,(r, \theta) = \text{const.}\, \frac{1}{r}\, e^{-ikr}\, \frac{J\,(k \cdot a \cdot \sin \theta)}{k \cdot a \cdot \sin 0} \tag{4}$$

où: r = la distance radiale de la source-piston (son centre);
θ = l'angle entre r et l'axe de symétrie;
J = la fonction de Bessel.

Le premier lobe d'émission étalon d'une source-piston est placé sous l'angle $\theta = 0{,}85\ \lambda/a$; dans notre cas de 2 et 4 MHz, cette relation donne les valeurs $\theta_2 = 0{,}2$ respectivement, $\theta_4 = 0{,}01$

Ces résultats indiquent que, pour la fréquence de 2 MHz, la divergence du faisceau ultrasonique a un petit apport, et à 4 MHz cette contribution est encore plus faible, et bien plus faible que l'éreur expérimentale pour la détermination de α.

Pour calculer la correction de réflexion on doit tenir compte de l'amplitude de la pression ultrasonique initiale ($A_\circ$) et de l'amplitude réfléchie (A_r) sur la face opposée de l'éprouvette, en obtenant:

$$A_r = A_\circ\, \frac{R_1 - R_2}{R_1 + R_2} \tag{5}$$

où R_1 et R_2 sont les impédances acoustiques spécifiques du milieu 1 (pour l'acier $R_1 \approx 45.10^5$ et 2 (pour l'air $R_2 \approx 40$ g/cm^2.s); il est évident que cette perte est trés faible (de l'ordre du millième du pourcentage) et, par conséquence, négligeable.

La diffraction des ondes ultrasoniques est soumise aux lois d'optique, la propagation dans le cas d'une fente ou d'un obstacle, étant fonction de leurs dimensions et de la longuer d'onde. D'après Seki, Granato et Truell [6], surtout dans le domaine megacyclique inférieur, la diffraction est responsable d'une allure non-exponentielle de la courbe d'atténuation. Ils ont démontré que la diffraction fournit un apport de 1 dB. λ/a^2, c'est-à-dire, dans notre cas, de 0,1 dB/cm. C'est une valeur assez grande mais qui peut être reduite et négligée par un travail expérimental correct, comme on le voit dans les fig. 1...5.

On evalue l'effet de non-parallélisme des faces de l'éprouvette, le cristal étant en même temps émetteur et récepteur, en partant aussi de l'hypothèse que le cristal de rayon „a“ travaille comme une source-piston dans un milieu demi-infini. Si φ est l'angle entre les normales sur les deux faces de l'éprou-

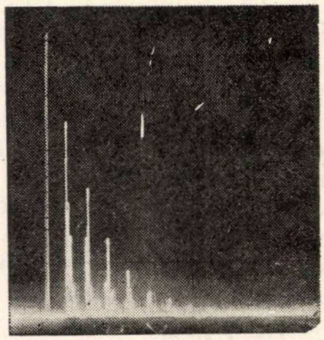

Fig. 1. Acier OL 37. Recuit. Fréquence 2 MHz.

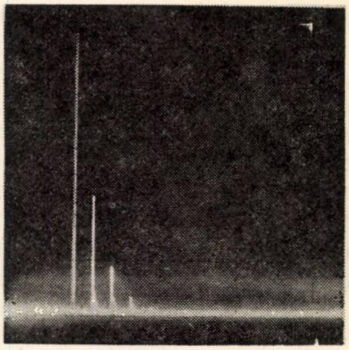

Fig. 2. Acier OL 37. Recuit. Fréquence 4 MHz.

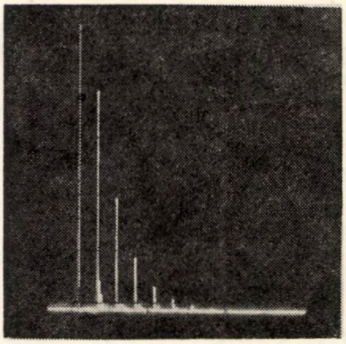

Fig. 3. Acier OL 37. Normalisé. Fréquence 4 MHz.

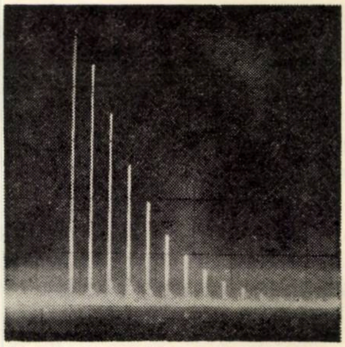

Fig. 4. Acier OL 37. Trempé Fréquence 4 MHz.

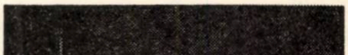

Fig. 5. Acier OL 37. Trempé et revenu. Fréquence 4 MHz.

vette, pour l'écho d'ordre n, la condition que le non-parallélisme n'ait pas d'effet sur les échos réflechis, est:

$$\varphi \leqslant 0{,}6\ \lambda/a{\cdot}n$$

Pour $n = 6$ (trois couples d'échos), a et λ comme ci-dessus, on obtient $\varphi \leqslant 0{,}01$; on peut prendre $\varphi \approx 1/10.000$, condition aisèment realisée en pratique (dans notre cas $\varphi = 1/12500$).

4. INTERPRÉTATION DES RÉSULTATS

Les résultats obtenus (tableaux 3.a. et 3.b indiquent:

a) L'atténuation augmente en même temps que les éléments structuraux; les aciers recuits ont les grains d'environ ⌀ 1mm, et en état trempé les grains sont dix fois plus petits;

b) L'atténuation dans les éprouvettes trempées, ou trempées et revenues, est considérablement réduite par rapport aux éprouvettes recuites parce que la martensite — constituant structurel de l'acier trempé — est élastiquement moins anisotrope que la pérlite et la férrite.

c) L'atténuation augmente rapidement avec la fréquence; la croissance de α est de 5 ... 30% pour des matériaux trempés, ou trempés et revenus, et de 30 ... 80 % pour ceux recuits, par rapport avec les valeurs de ε à 2 MHz.

On obtient ces résultats soit par calcul, soit directement, par l'examen des oscillogrames: on peut voir aisèment que l'image des matériaux recuits a un nombre réduit d'échos et plus fortement amortis.

La première constatation correspond qualitativement à la loi de diffusion Rayleigh: $\alpha \sim \bar{D}^3{\cdot}f^4$, l'atténuation augmentant rapidement avec $\bar{D}$.

La deuxième est aussi conforme à la théorie: c'est-à-dire, l'atténuation augmente avec l'anisotropie élastique comme l'ont constaté Merkulov et Papadakis [3, 4]. En ce qui concerne la variation de α, en fonction de la fréquence, les résultats montrent vraiment que α augmente rapidement avec f, mais cette augmentation est cependant insuffisante pour vérifier la loi en f^4. Cette question n'est pas surprenante, la théorie de la propagation des ultrasons, dans les milieux solides polycristallins, étant encore approximative. D'autre part, les travaux de Merkulov [3] concernant l'atténuation dans certains aciers, ont indiqué que seulement au-dessus de 5 ... 6 MHz l'atténuation augmente fortement avec f, la croissance étant pratiquement linéaire jusqu'à ce moment.

5. CONCLUSION

A. On a mis en évidence des variations quantitatives (valeurs du coefficient d'atténuation) concernant la propagation des ultrasons de 2 MHz par rapport a ceux de 4 MHz, dans des milieux solides polycristallins(aciers).

B. La propagation des ultrasons est fortement influencée par les modifications de la structure cristalline, qui ont lieu pendant le traitement ther mique, par suite du changement des dimensions des éléments structuraux et de la variation des propriétés élastique du milieu de propagation.

C. Dans des conditions expérimentales correctes, l'atténuation est le phénomène principal qui détermine les pertes d'énergie dans la propagation des ultrasons.

D. On considère que l'approfondissement théorique et expérimentale de ce domaine, conduira à l'établissement d'une nouvelle méthode d'étude des propriétés des corps solides polycristallins avec les ultrasons.

BIBLIOGRAPHIE

1. Crawford A. E. — Technique des ultrasons. Application a basse et haute puissance. Paris, Dunod, 1959.
2. Merkulov L. G. — J. Tehn. Fiziki, vol. 26, nr. 1, 1956.
3. Merkulov L. G. — J. Tehn. Fiziki, vol. 27, nr. 6, 1957.
4. Papadakis E. P. — J. Appl. Physics. vol. 35, nr. 5, 1964.
5. Roderick R. L. Truell R. — J. Appl. Physics. vol. 23, nr. 2, 1952
6. Seki H., Granato A., Truell R. — J. Accoust. Soc. Am. vol. 28, nr. 230, 1956.

LA RÉTICULATION INTERMOLÉCULAIRE DES POLYMÈRES

I. C. PETREA

INTRODUCTION

La réticulation des molécules en longues chaînes donne lieu à des possibilités assez originales d'applications de la thermodynamique statistique. Il est connu que les polymères réticules ou vulcanisés sont constitués de molécules en longues chaînes, avec des groupes susceptibles de se souder les uns aux autres d'une manière illimitée, soit conduisant à des molécules très longues, linéaires ou quelque peu ramifiées.

Notre but est de montrer comment on peut appliquer les relations fondamentales qui lient la structure d'un réseau tridimensionnel lâche à ses propriétés physiques. On peut dans une assez grande mesure appliquer les notions de la mécanique statistique à de tels arrangements et en tirer des enseignements très intéressants, qui ont bien expliqué les manifestations macroscopiques résultant directement de la forme de l'édifice moléculaire.

La mesure du degré de réticulation est un moyen pratique de contrôle et un outil de recherche en analyse des structures macromoléculaires. La connaissance de cette densité de réticulation permet d'une part, de classer un polymère donné et, d'autre part de prévoir le comportement physique de ce matériau à une sollicitation mécanique ou thermique quelconque.

ANALYSE THÉORIQUE. NOTATIONS

Pour commencer cette analyse il faut tout d'abord se donner un modèle conformationnel macromoléculaire. Considérons le cas simple d'une chaîne où tous les éléments monomériques sont les mêmes. On sait que les angles des éléments de la chaîne restent constants, en première approximation, mais que, l'un de ces éléments étant fixe, l'élément voisin peut se trouver dans une position quelconque sur un cône de rotation. Le résultat de cette situation est que la longuer L de la chaîne, définie comme la distance entre ses deux extrémités, n'est pas déterminée.

Sur cette base conformationnelle il est possible de calculer une certaine longuer quadratique moyenne $\langle L^2 \rangle$ en fonction du nombre n d'éléments et de la longuer l de cet élément (Eyring, 1932):

$$\langle L^2 \rangle = n \cdot l^2 \, \frac{1 + \cos\theta}{1 - \cos\theta} \tag{1}$$

θ étant le demi-angle du sommet du cône de rotation.

Les forces Van der Waals s'exerçant, aux basses temperatures, entre les divers atomes d'éléments suffisamment voisins d'une même micromolécule, sans même parler des forces entre éléments de molécules différentes mais voisines, introduisent des limites aux rotations possibles. Les positions préférées des micromolécules en respectant l'angle des liaisons, et en admettant des rotations, sont celles qui allongent la chaîne macromoléculaire. [1]

Si $U(\alpha)$ est l'énergie potentielle à surmonter pour tourner d'un angle α sur le cône de rotation, la probabilité d'avoir un angle α compris entre α et $\alpha + \mathrm{d}\alpha$ est modifieé par un facteur de Boltzmann et on arrive à:

$$W(\alpha) \cdot d\alpha = W_\circ \cdot \exp\left(-\frac{U(\alpha)}{KT}\right) \cdot \mathrm{d}\alpha \tag{2}$$

le facteur $W_\circ$ exprimant la probabilité conformationnelle et normalisant la probabilité à l'unité, c'est-à-dire choisi tel que:

$$\int_{-\pi}^{\pi} W(\alpha) \cdot d\alpha = 1. \tag{3}$$

Les résultats dépendent finalement d'un seul paramètre $U_\circ / KT$, $U_\circ$ mesurant la barrière de potentiel qui, grossièrement, s'oppose à la rotation.

Une faible réticulation entraîne une augmentation de la masse moléculaire moyenne $\langle M \rangle$; nombre de ponts liant une molécule à celles qui l'environnent reduit la mobilité microconformationnelle des segments macromoléculaires. Il s'agit donc, en première analyse d'évaleur le nombre p_0 de ponts, c'est-à-dire le coefficient de pontage

$$p_\circ = d_r \cdot \langle P \rangle \tag{4}$$

en fonction du $\langle P \rangle$ — le degré de polymérisation moyen en poids, et d_r — la densité de réticulation, c'est-à-dire, la proportion d'éléments monomèriques d'une chaîne portant un pont (R. Famechon, 1968). Le coefficient $p_\circ$ a une signification, effectivement, statistique [2]. Trois méthodes permettent d'obtenir le résultat cherché: module élastique à l'équilibre, solubilité et gonflement par un solvant.

Divers auteurs utilisent une définition lègèrement différente de la densité de réticulation

$$d_r = q \cdot \frac{m_\bullet}{m} \tag{5}$$

qui permet de relier:

q — le nombre de chaînes élémentaires, segments macromoléculaires entre deux ponts consécutifs;

m_o — la masse moléculaire du monomère;
m — la masse spécifique du polymère.

On peut donc définir un coefficient de pontage proportionel au degré de polymérisation

$$p_o = q \cdot \frac{m_o}{m} \cdot \langle P \rangle \tag{6}$$

En exploitant une formule connue

$$S = K \cdot \log Q \tag{7}$$

la methode de l'entropie statistique d'une chaîne macromoléculaire nous permet de raisonner, en supposant que l'entropie S est proportionnelle au logarithme du nombre total $Q(L, l, p_o)$ des conformations possibles. Nous nous proposons donc d'étudier dans ce cas une entropie que nous pourrions appeler entropie du réseau.

PRINCIPE DU CALCUL INTERPRÉTATION

Supposons que l'on réticule un système polymérique comprenant N chaînes de même espèce dans un volume V.

Dans l'état initial, $p_0 = 0$, chacune de ces chaînes, qui peut à elle seule constituer un ensemble doué de propriétés statistiques, a une entropie

$$S_o - K\beta^2 L^2,$$

où β dépend essentiellement du nombre n d'éléments monomériques d'une chaîne et de la longueur 1 d'un élément.

La création de ponts, par des procédés physiques, sous tension mécanique, irradiation ou en présence d'un solvent mésomorphe, doit conduire à un réseau. La pénétration des micromolécules du solvent au sein des chaînes macromoléculaires ne peut se faire que par extension du réseau et augmentation de l'énergie libre $F = U - T\,S$, due, principalement, à la diminution d'entropie du réseau.

Dans un solvent nématique orienté, une chaîne peut avoir la conformation d'un ellipsoïde allongé [3].

Une certaine proportion de ponts, fonction d'ailleurs de la nature du polymère initial, apporte ainsi une modification des propriétés.

Lorsque l'on fait varier la densité de réticulation d_r, il faut considérer les variations du paramètre L et les transitions conformationnelles des chaînes [4]:

$$\mathrm{d}N = N\beta^3/\pi^{3/2} \cdot \exp(-\beta^2 \cdot L^2) \cdot \mathrm{d}L \tag{8}$$

Il y a évidemment quelque rapport entre le coefficient de pontage p_o et l'entropie totale du polymère que l'on vient de calculer:

$$S_1 = \int S_1' \cdot \mathrm{d}N = \frac{N\beta^3}{\pi^{3/2}} \int (S_o - K\beta^2 L^2) \cdot \exp(-\beta^2 L^2) \cdot \mathrm{d}L \tag{9}$$

Ici, S'_1 réprésente l'entropie d'une chaîne pour de très faibles valeurs de la densité de réticulation. L'action de 1 mégarad sur le polyéthylène $-\langle P\rangle \simeq$ $\simeq 2.10^3 -$ crée, en moyenne, 2 ponts pour 3.10^3 éléments monomériques.

On sacrifie quelque peut de riguer en ne considérant pas log $(L_{ox}\cdot L_{oy}\cdot L_{oz})$ et ainsi l'integrale(9) donne:

$$S_1 = N\left(S_o - \frac{3}{2}K\right). \tag{10}$$

Dans le cas de fortes réticulations il faut considérer $S(N, L, p_o)$ et écrire que l'entropie d'un tel système devient:

$$S_2 = \int S'_2\cdot \mathrm{d}N = \frac{N\beta^3}{\pi^{3/2}}\iiint [S_o - K\beta_2(p_{ox}^2\cdot L_{ox}^2 + p_{oy}^2 L_{oy}^2 +$$

$$+ p_{oz}^2\cdot L_{oz}^2)]\exp(-\beta^2L^2)\,\mathrm{d}L_{ox}\cdot \mathrm{d}L_{oy}\cdot \mathrm{d}L_{oz} \tag{11}$$

où S_2 est l'entropie d'une chaîne liée par un certain nombre de ponts. Il existe, en fait, une infinité de réseaux tridimensionels du polymère présentant encore une certaine thermoplasticité.

RÉSULTATS ET CONCLUSIONS

Remarquons que dans ce cas, pour caractériser „en moyenne" un réseau tridimensionnel, $L^2 = L_{ox}^2 + L_{oy}^2 + L_{oz}^2$, on peut introduire une fonction à une variable, alors définie par

$$p_o(L)\cdot \mathrm{d}L = \mathrm{d}L\int p_o(L, \alpha)\cdot \mathrm{d}\alpha \tag{12}$$

qui donne la probabilité que la chaîne moléculaire ait la longueur $L \pm \mathrm{d}L$ quel que soit l'angle α.

Avec

$$p_o^2 = p_{ox}^2 + p_{oy}^2 + p_{oz}^2 \tag{13}$$

et, en negligeant log $(p_{ox}\cdot p_{oy}\cdot p_{oz})$, on aura, en particulier:

$$S_2 = N\left[S_0 - \frac{K}{2}(p_{ox}^2 + p_{oy}^2 + p_{oz}^2)\right] \tag{14}$$

Comparant (10) et (14) on trouve

$$\Delta S = \frac{3NK}{2}\left(1 - \frac{p_o^2}{3}\right) \tag{15}$$

A ce stade les résultats ne tiennent pas compte des corrections de fins de chaînes. Il est hors de doute que cette correction s'impose mais elle est vraisemblablement progressive en fonction du degré de réticulation.

Ces résultats ne sont pas restreint à l'entropie du réseau, et on peut les généraliser beaucoup [5].

BIBLIOGRAPHIE

1. P. J. Flory, Statistical Mechanics of Chain Molecules, Interscience Publishers, New-York, 1969.
2. P. G. de Gennes, Phys. Letters 28 A, 725, (1969).
3. G. Chistiacov, Soviet Physics Uspekhi, 9, 551, (1967).
4. I. C. Petrea, Termodinamica statistică a macromoleculelor, Editura didactică şi pedagogică, Bucureşti, 1968.
5. S. F. Edwards and K. F. Freed, J. Phys. C., 762, (1970).

RESONANT TRANSFER OF ENERGY IN ONCOGENESIS

ION BĂIANU

ABSTRACT

A new hypothesis concerning the physical mechanism of initiation of cancer is advanced which provides a theoretical basis for a rational chemotherapy of cancer. According to this working hypothesis, in the initiation of cancer, the relevant physical process is *the resonant transfer of energy* from carcinogens to the genetic system of the cell, or the resonant absorption of energy by the genetic system of the cell from an external electromagnetic source.

INTRODUCTION

There is a general agreement among those who study oncogenesis that cancer might be initiated by a specific physical process which results in a definite (but still undefined) change of the cell division control. The aim of this paper is to advance a working hypothesis concerning this specific physical process and to derive some of its consequences.

The basic idea is that the cell division control is carried out by cellular subsystems which control the release of energy in the neighbourhood of *DNA* Thus, the division of a cell would be triggered by a precise amount of energy which is released in the immediate neighbourhood of *DNA* macromolecules. As a consequence, a transfer of energy along the *DNA* macromolecule could be the mechanism through which the attached *DNA*-polymerase is activated step by step, and advances sequentially to the other end of *DNA* macromolecule.

Any perturbation of this process would also perturb the control of cell division. Thus, a carcinogen could initiate a premature division of a cell by supplying the necessary amount of energy through a process of *resonant transfer of energy.*

EXPERIMENTAL EVIDENCE

By now, there is a very well known fact that some acridines which are also carcinogens could transfer energy to *DNA* (1°). There is also some indirect evidence for a resonant transfer of energy from carcinogen hydrocarbon molecules to *DNA*. However, there is no report in the current literature on cancer which connects these experimental facts with the initiation of oncogenesis.

In a series of experiments, I have tried to obtain evidence for a resonant transfer of energy from p-dioxane (which is also a carcinogen substance) to *DNA*. The absorption and emission spectra in *UV*, at low and normal temperatures, of these molecules in water solutions were recorded. A comparison of these spectra supports the hypothesis of a resonant transfer of energy from p-dioxane to *DNA*. In order to determine the range of the interactions between *DNA* and p-dioxane, the *NMR* high resolution spectra of solutions of *DNA* and p-dioxane were recorded. These spectra suggest that a dipole-induced dipole interaction between *DNA* and p-dioxane would be possible.

The emission spectra of solutions (or frozen solutions) containing *DNA*, a carcinogen and an anticarcinogenic substance could be used as criteria for the efficiency of the tested carcinogenic substance.

The hypothesis of the initiation of cancer through a resonant transfer of energy suggests that quenchers of fluorescence might be used as anticarcinogenic drugs. Thus, this theoretical hypothesis provides a basis for a rational chemotherapy of cancer. This conclusion is amended by the theoretical models formulated in (2°) and (3°). Also, one should pay attention to the fact that nothing was said here about the possible mechanisms of the process of growing of tumors. Consequently, the choice of a specific drug with anticarcinogenic action would also depend on its toxicity, solubility in water, and penetrability in cancer cells.

The author would like to thank Drs. Silviu Mandache, E. Truţa and O. Hörer for technical help and assistance.

REFERENCES

1. Delmelle, M et Duchesne, J. *Comptes Rendus Acad. Sci. Paris*, Série D, t. *264*, (1967), 138.
2. Băianu, I. *Theoretical Models of Oncogenesis.*, Thesis, Faculty of Physics, Bucharest.
3. Băianu, I. „Changes in the Cell Division Control in Oncogenesis.", (paper presented at the V-th National Symposium of Biophysics, Bucharest (1969).

APLICAREA TERMODINAMICII PROCESELOR IREVERSIBILE LA STUDIUL CONTRACȚIEI MUSCULARE

IRINA RUSSU și D. G. MĂRGINEANU

REZUMAT

Obiectivul acestei lucrări este obținerea unui tablou unitar al energeticii contracției musculare pe baza datelor existente, folosind noțiunile și metodele termodinamicii proceselor ireversibile.

După o scurtă prezentare a fenomenologiei contracției, sînt definiți parametrii caracteristici ai sistemului „miofibr lă", apoi se calculează funcția de disipare și ecuațiile fenomenologice asociate proceselor din acest sistem. Pe baza acestora este analizată problema randamentului conversiei chemo-mecanice de energie în diferitele tipuri de contracție considerate ca regiumuri diferite de funcționare ale unui convertizor de energie liniar autoreglat. În final sînt sugerate unele informații pe care le pot furniza datele de energetică asupra mecanismului molecular al contracției musculare.

INTRODUCERE

Motilitatea este o însușire generală a materiei vii, aproape toate celulele prezentînd activitate de mișcare specializată pentru un anumit scop. Astfel, în timpul diviziunii celulare, fibrele din citoplasmă ajută la despărțirea materialului cromozomal al nucleului iar apoi la despărțirea celor două celule fiice. Membrana celulară și cea nucleară suferă contracții și relaxări ce duc la schimbări de formă și volum. Mitocondriile și cloroplastele au cicluri de umflare și strîngere („swelling-schrinking") legate de transportul de electroni și de fosforilarea oxidativă. Paramecii, amoebele și alte organisme unicelulare se mișcă datorită proceselor contractile din citoplasmă și membrană. Spermatozoizii se mișcă datorită flagelui care efectuează mișcări bidimensionale de biciuire. Indiferent de tipul lor, aproape toate sistemele contractile posedă sistemul actomiozinic ce poate converti la nivel molecular energia chimică a *ATP* în energie mecanică, în condițiile prezenței în anumite raporturi a ionilor alcalino-pămîntoși (Ca^{2+}, Mg^{2+}).

De la un anumit nivel al evoluției regnului animol au apărut celule specializate pentru realizarea motricității, fibrele musculare ce alcătuiesc mușchii striați sau scheletali și mușchii netezi sau viscerali.

FENOMENOLOGIA CONTRACŢIEI MUSCULARE (1;5)

Principalele aspecte ale fiziologiei contracţiei fibrei musculare striate sînt, pe scurt, următoarele.

Pe axonul unităţii motorii din care face parte fibra soseşte un potenţial de acţiune (impuls nervos) care depolarizează membrana presinaptică a joncţiunii neuro-musculare şi determină eliberarea masivă a mediatorului chimic (acetilcolină, adrenalină, nonadrenalină). Aceasta difuzează prin spaţiul sinaptic determinînd depolarizarea membranei postsinaptice, deci a unei porţiuni a membranei fibrei musculare. Această depolarizare locală este suficientă pentru producerea unui potenţial de acţiune ce se propagă în ambele sensuri pe sarcolemă cu viteza de $= 5$ m/s. Acest impuls electric determină eliberarea Ca^2 din pereţii reticolului sarcoplasmic şi inhibarea factorului de relaxare ce impiedică formarea complexului actomiozinic (*AM*). Toate procesele ce au loc între depolarizarea sarcolemei şi începutul răspunsului mecanic constituie cuplajul excitaţie-contracţie şi sînt denumite prin termenul general de *activare*. Un muşchi activat se contractă, adică se scurtează şi dezvoltă o tensiune. Două cazuri limită ale contracţiei sînt: producerea unei tensiuni fără scurtare (contracţie izometrică) şi scurtare liberă (contracţie izotonică cu încărcare nulă).

Aspectul fiziologic aparent simplu al producerii de către fibra musculară a unui lucru mecanic (*W*) prin transformarea energiei chimice stocate în unii compuşi macroergici, ascunde un mecanism molecular extrem de complex şi descifrat numai parţial. În prezent pare a fi o certitudine faptul că aspectul mecanic al fenomenului de contracţie constă la nivel molecular din alunecarea filamentelor subţiri de actină printre cele groase de miozină, alunecare ce duce la creşterea zonei de întrepătrundere dintre cele două tipuri de filamente şi la scurtarea fibrei. Forţele care produc această mişcare, în ultimă instanţă de natură electrică, nu sînt determinate exact ci sînt postulate de către fiecare model al contracţiei.

Pe de altă parte este stabilit faptul că energia chimică transformată de către muşchi provine din reacţia de hidroliză a *ATP* care apoi este imediat refăcut pe seama scindării fosfocreatinei. Rămîne însă necunoscut modul concret în care această energie de hidroliză a *ATP* determină alunecarea miofilamentelor, deci producerea de lucru mecanic.

Cea mai răspîndită ipoteză este cea care presupune existenţa punţilor încrucişate („cross-bridge") între filamentele de actină şi cele de miozină. Din faptul că într-o contracţie obişnuită filamentele de actină glisează cu 2000—3000 Å unele faţă de altele, iar locurile de pe filamentele de miozină care pot forma punţi sînt la numai cîteva sute de Å unul faţă de altul, rezultă că legăturile actomiozinice trebuie să se formeze şi să se desfacă de cîteva ori în cursul mişcării filamentelor. La fiecare punte are loc un proces ciclic de formare şi menţinere a punţii — timp în care are loc probabil dezvoltarea forţei de alunecare — urmat de ruperea ei. Ciclul se reia cu formarea legăturii între acest loc de pe filamentul de miozină şi altul de pe filamentul glisant de actină. Reacţia de formare a punţii implică şi ruperea *ATP* din care se eliberează energie. După unul din modelele cele mai întîlnite bazate pe ipoteza punţilor încrucişate, reacţiile care au loc ar fi (8):

1) Formarea legăturilor actomiozinice în dreptul punţilor:

$$A + \mathcal{M} - ATP \longrightarrow A - \mathcal{M} - ATP$$

(ATP este presupus legat de miozină).

2) Scindarea ATP sub acţiunea ATP-azică a AM, activată de ionii Mg^{2+}

$$A - \mathcal{M} - ATP \longrightarrow A - \mathcal{M} - ADP + P$$

3) Refacerea ATP:

$$A - \mathcal{M} - ADP + ATP \longrightarrow A - \mathcal{M} - ATP + ADP$$

4) Desfacerea legăturii actomiozinice respective în vederea formării unei punţi cu un loc învecinat:

$$A - \mathcal{M} - ATP \longrightarrow A + \mathcal{M} - ATP$$

În afară de modelele care presupun existenţa punţilor încrucişate actomiozinice (2, 8, 9) există mai multe altele care presupun diferite alte mecanisme:

— alunecarea filamentelor datorită unor forţe electrice dintre actină şi miozină, fără intervenţia unor molecule intermediare (14);

— trecerea actinei şi miozinei în stări cu grad crescut de împachetare prin spiralare sau formarea unei structuri cuaternare ghem (4, 12);

— existenţa unor forţe elastice datorită proprietăţilor elastice ale sarcolemei şi unor structuri speciale localizate în zone Z (15);

CONVERSIA CHEMO-MECANICĂ DE ENERGIE ÎN MUŞCHI

Se poate studia problema conversiei de energie în muşchi, ca şi în alte sisteme biologice, ignorînd structura şi mecanismul de funcţionare al acestuia, descriind numai cu ajutorul termodinamicii proceselor ireversibile cuplajul între una sau mai multe reacţii chimice şi producerea scurtării şi a tensiunii. Totuşi această descriere nu este completă din punct de vedere energetic pentru că nu include o proprietate importantă a acestei conversii: *reglajul*.

Muşchiul posedă capacitatea de a-şi autoregla „inputul“ de energie în funcţie de necesităţile de „output“ cerute. Această proprietate face ca în cazul sistemului contractil să fie necesară completarea tratării termodinamice fenomenologice printr-o interpretare de funcţionare a reglajului.

Sistemul la care ne referim în tratarea de mai jos este miofibrila (fig. 1). Vom deduce din considerente energetice funcţia de disipare a acestui sistem, iar apoi, prin comparare cu expresia generală vom identifica fluxurile şi forţele termodinamice ce caracterizează cuplajul chemomecanic în muşchi.

Ecuaţia Gibbs pentru miofribrila aflată în contracţie tetanică cu amplitudine constantă şi mică (caz în care ea se găseşte în stare staţionară) este (3):

$$\mathrm{d}U^{I} = T \cdot \mathrm{d}S^{I} - p\,\mathrm{d}v^{I} + \Sigma\, \mu_i^{I}\,\mathrm{d}n$$

unde notaţiile au sensurile obişnuite iar indicele (I) arată referirea la miofibrilă.

În urma contracției energia exteriorului miofibrilei, subsistemul II din figură, a variat cu:

$$dU^{II} = T \cdot dS^{II} + p\,dv^{II} + \Sigma \mu_i^I\,dn + P\,dx$$

unde P reprezintă tensiunea stabilită în mușchi, evident egală cu încărcarea, iar dx variația diferențială a lungimii.

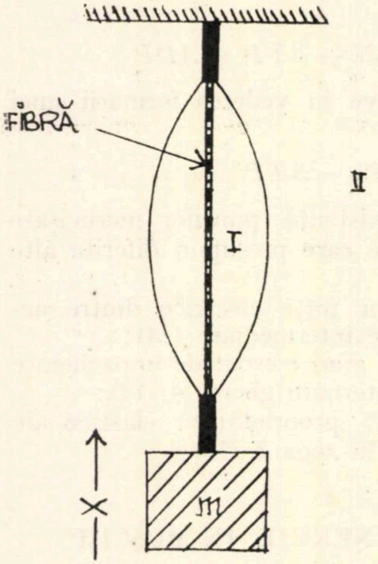

Fig. 1

Principiul conservării energiei: $dU^I + dU^{II} = 0$, ne dă din cele două ecuații de mai sus expresia producerii de entropie în subsistemul I:

$$T \cdot d_i \cdot S^I = -P\,dx - \Sigma\,(\mu_i^I\,dn_i^I + \mu_i^{II}\,dn_i^{II})$$

în care se ține seama că variația de entropie în subsistemul II (dS^{II}) se datorește numai schimbului reversibil de căldură cu subsistemul I.

Pornind de la definiția funcției de disipare:

$$\Phi = T \cdot \frac{d_i S}{dt},$$

expresia ei este:

$$\Phi = -P \cdot V + \sum_{j=1}^{m} A_j \cdot \nu_j$$

ținînd seama că variațiile dn_i^I și du_i^{II} se datoresc unui număr m de reacții independente cu afinitățile A_j și vitezele ν_j. Aici: $V = \frac{dx}{dt}$ reprezintă viteza de contracție.

Presupunînd că din cele m reacții una singură (k) este cuplată direct cu mecanismul de contracție, putem separa în Φ doi termeni:

$$\Phi_1 = -P \cdot V + A_i \cdot \nu_k; \quad \Phi = \sum_{j \neq k} A_j \cdot \nu_j$$

din care numai Φ_1 caracterizează efectiv cuplajul chemo-mecanic. Deci conversia de energie din mușchi este descrisă de funcția de disipare:

$$\Phi = -P \cdot V + A \cdot \nu$$

Comparînd această formulă cu expresia generală a funcției de disipare: $\Phi = \sum_i X_i J_i$, se poate conchide că cuplajul chemo-mecanic din mușchi implică ca fluxuri termodinamice V și ν iar ca forțe termodinamice $-P$ și A.

Se poate scrie dependenţa dintre forţe şi fluxuri sub forma ecuaţiilor fenomenologice:

$$V = L_{11}(-P) + L_{12}A$$

$$\nu = L_{21}(-P) + L_{22}A$$

în care coeficienţii fenomenologici L_{ij} sînt independenţi de P şi A dar dependenţi de starea sistemului. Se impune observaţia că liniaritatea presupusă de ecuaţiile fenomenologice este general valabilă în muşchi, chiar dacă afinitatea reacţiei cuplante este mare, căci în acest caz putem presupune reacţia globală descompusă într-un număr de reacţii elementare fiecare cu o afinitate suficient de mică pentru a-i putea aplica legi liniare (13).

Ecuaţiile fenomenologice descriu cuplajul reacţiei chimice cu mecanismul contractil din muşchi, cuplaj prin care se realizează transformarea energiei chimice în energie mecanică. Aşa cum s-a arătat mai sus, această conversie este reglată, în sensul că *puterea produsă este constantă*, indiferent de încărcare, ceea ce arată că muşchiul are capacitatea de a-şi autodetermina „inputul" de energie în funcţie de P, astfel ca „outputul" să fie constant. Această proprietate importantă a muşchiului este descrisă de o ecuaţie empirică, ecuaţia forţă-viteză Hill (6), sub forma unei legături funcţionale dintre încărcare şi viteza de contracţie:

$$(P + a)V = (P_0 - P)b$$

în care a şi b sînt nişte constante empirice iar P_0 este tensiunea izometrică. O descriere completă a conversiei de energie în muşchi implică deci cu necesitate completarea ecuaţiilor fenomenologice prin ecuaţia Hill.

În acest context se impune observaţia făcută de Caplan (3) cu privire la caracterul reglat al conversiei de energie în muşchi. El a găsit o asemănare perfectă între forma ecuaţiei Hill şi ecuaţia generală ce caracterizează reglajul în traductorii liniari de energie autoreglaţi programaţi cu informaţie minimă. Această similitudine formală poate avea implicaţii mai adînci permiţînd încadrarea muşchiului în această clasă de traductori. Înţelegerea efectivă a funcţiei reglatoare a muşchiului, deci implicit a sensului ecuaţiei Hill, nu este posibilă decît prin postularea unor date biochimice sau structurale. Tratarea conversiei de energie în muşchi nu poate fi deci strict termodinamică ci impune folosirea şi elucidarea anumitor date de mecanism.

EFICIENŢA CONVERSIEI DE ENERGIE ÎN MUŞCHI

Pentru muşchi, ca de altfel pentru orice sistem biologic, este extrem de important a se şti cîtă energie utilă se poate obţine dintr-o cantitate dată de hrană, deci dintr-un total de energie chimică disponibilă. Acest aspect economic este complet descris de mărimea numită eficienţă de funcţionare ε. În muşchi, considerat ca sistem cu două procese cuplate, ea se defineşte prin relaţia: $\varepsilon = P.V/A\text{-}\nu$, adică raportul dintre lucrul mecanic produs şi energia chimică metabolică consumată.

Experimental se măsoară eficienţa de entalpie a muşchiului definită prin:

$$\varepsilon' = W/W + Q = PV/P\,V + Q$$

şi, dacă considerăm că producerea de căldură a muşchiului este asociată strict numai cu fenomenele ireversibile ale cuplajului, cele două expresii sînt echivalente. Coincidenţa între valorile experimentale ale ε şi ε_1 arată că această supoziţie este justă.

Dintre cele 4 variabile (A; ν; P; V) care determină starea de funcţionare a muşchiului, numai una este independentă datorită celor 3 ecuaţii care le leagă (ecuaţiile fenomenologice şi ecuaţia Hill). Această variabilă este încărcarea P, dat fiind rolul ei în reglaj, în determinarea „inputului" astfel ca „outputul" să fie constant. Rezultă deci că eficienţa depinde de starea de funcţionare numai prin intermediul încărcării. Reprezentarea acestei dependenţe teoretice, dedusă din cele 3 ecuaţii, este dată în fig. 2. Concordanţa acestei curbe cu datele experimentale este foarte bună.

Creşterea eficienţei în domeniul $[0;\ 0,\ 4P_0]$ poate fi uşor interpretată termodinamic. Odată cu creşterea încărcării, viteza de contracţie scade conform ecuaţiei Hill sub valoarea V_m corespunzătoare unei contracţii libere ($P = 0$). O viteză a procesului din ce în ce mai mică scade caracterul de ireversibilitate al transformării, micşorînd deci fracţia de energie liberă ce se degradează în căldură. Teoretic vorbind, am putea obţine o transformare totală în lucru mecanic a energiei libere disponibile, obligînd procesul să se desfăşoare de-a-lungul curbei lungime — tensiune izometrică, deci printr-o succesiune de stări de echilibru. Forma cubei pentru domeniul $[0,\ 4P_o;\ P_o]$ se poate explica numai printr-o analiză mai aprofundată a diferitelor stări de funcţionare ale muşchiului.

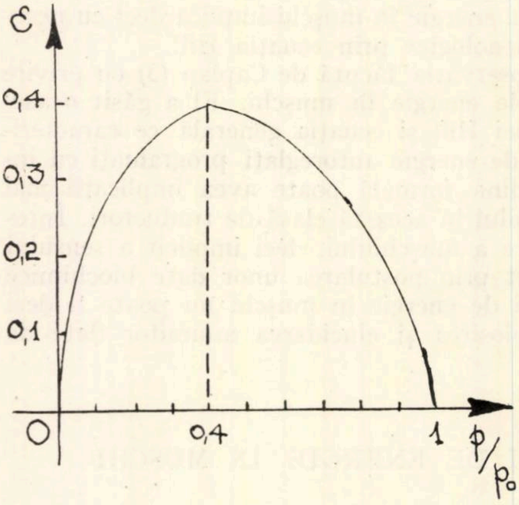

Fig. 2

Contracţia izometrică sau tetanusul reprezintă o stare în care muşchiul este menţinut activat la o anumită lungime, deci la o anumită tensiune P_o. În această stare, muşchiul nu produce un lucru mecanic net, ci numai o tensiune. În realitate are loc o producere de lucru intern, datorită deformării elementelor elastice din muşchi de către cele contractile, tocmai în vederea realizării acestei tensiuni. Starea de tetanizare este caracterizată energetic printr-o producere de căldură (căldura de menţinere) care reprezintă o măsură a eficienţei cu care muşchiul menţine o anumită tensiune. Această cantitate de căldură este şi o expresie energetică a cuplajului excitaţie — contracţie, ale cărui fenomene sînt parţial reluate odată cu fiecare reluare a stimulului de menţinere a tetanizării. Viteza termogenezei de menţinere variază în timp după legea (1): $Q_m = q_A \exp(—dt) + q_B$, atingînd o valoare constantă q_B. Acest fapt ne indică împreună cu alte argumente structurale şi biochimice că aceasta este o stare staţionară.

Punînd în expresia funcţiei de disipare stabilită anterior:

$$V = O; \quad A = A_o; \quad \nu = \nu_o; \quad P = P_o, \text{ se obţine: } \quad \Phi_o = A_o \cdot \nu_o$$

care descrie termogeneza constantă de menţinere.

Din punct de vedere al economiei energetice, această variaţie a termogenezei de menţinere a fost interpretată de Marèchal şi Monnaerts (10) ca o expresie a perfecţionării eficienţei chiar în cadrul aceluiaşi act contractil. În acelaşi sens se observă o variaţie a acestei termogeneze la diferiţi muşchi în funcţie de rolul lor în organism. Astfel, la muşchii lenţi care menţin mult timp starea activă numai cu cîteva stimulări, termogeneza de menţinere are valori mici. În schimb, la muşchii rapizi la care starea activă durează puţin timp, termogeneza de menţinere are valori mari (1).

* * *

Dacă unui muşchi în contracţie izometrică i se permite o scurtare izotonică, el va produce un lucru mecanic şi va degaja o cantitate de căldură în plus faţă de căldura de întreţinere a stării izometrice. Această *căldură de scurtare* (Q_s) este direct proporţională cu scurtarea (x) şi independentă de încărcare, deci de forma: $Q_s = a.x$. Totalul de energie este în acest caz:

$E = A + Px + ax$, în care termenul A include căldura de activare şi de menţinere *(căldura izometrică)*. Constatarea aceasta este de mare importanţă, arătînd că energia chimică ce intervine într-o contracţie este funcţie chiar de lucrul necesar a fi produs. Această comportare a muşchiului este cunoscută sub numele de efectul Fenn (11) ce descrie capacitatea reglatorie a muşchiului.

Pentru încărcări ale muşchiului peste $0{,}4P_0$, datorită dependenţei termogenezei de menţinere de P_o prin intermediul lungimii, producerea de căldură devine importantă, deci metabolismul total creşte şi raportarea făcîndu-se la aceeaşi producere de lucru mecanic în exterior, eficienţa ε scade. O urmărire riguroasă a variaţiei eficienţei de producere a W ne obligă să raportăm W produs la extrametabolismul ce îl însoţeşte şi în acest caz vom obţine previziunile teoretice de creştere monotonă a eficienţei cînd încărcarea creşte.

O imagine completă asupra economiei energetice a conversiei chemomecanice în muşchi trebuie să ia în considerare şi procesul de refacere, adică de resinteză a compuşilor macroergici hidrolizaţi în timpul contracţiei. Acest proces are ca expresie exterioară energetică o producere de căldură timp de cîteva zeci de minute de la relaxare. Experimental s-a stabilit (10):

$Q_{ref} = 1{,}1\ (W + Q_{in})$, unde Q_{in} reprezintă căldura degajată în contracţie şi relaxare. Deci energia totală necesară refacerii este: $E_{ref} = 1{,}1\ (W + Q_{in}) + (W + Q_{in}) = 2{,}1(W + Q_{in})$ deci de aproximativ două ori mai mare decît energia utilă pentru contracţie. Rezultă că eficienţa procesului de refacere este de $\approx 50\%$.

O stare de funcţionare deosebită a muşchiului este cea a alungirii forţate peste valoarea de repaus L_0, cînd muşchiul primeşte din exterior W, deci „efectuează lucru mecanic negativ“. O imagine intuitivă a acestei stări ne poate arăta că acum motorul muscular funcţionează ca un generator şi prin rezistenţa opusă absoarbe la o viteză finită lucru mecanic.

Spre deosebire de situaţia obişnuită, studiul termodinamic al eficienţei musculare are două aspecte. În principal, muşchiul este un producător de lucru mecanic, deci ca la orice motor este optimă obţinerea unui W cît mai mare dintr-o cantitate dată de energie chimică, prin micşorarea degajării de căldură. Însă, pe lîngă funcţia de contracţie, muşchiul mai are şi pe cea de *termoreglare*, aşa încît uneori este necesară o cît mai mică eficienţă a conversiei chemo-mecanice, pentru a se realiza o producere maximă de căldură. Este cazul stării de funcţionare numită frisonare, cînd rolul contracţiilor este producerea de căldură pentru menţinerea constantă a temperaturii respectivului organism homeoterm.

Concluzii

Studiul termodinamic al contracţiei musculare are rolul de a da o înţelegere energetică globală a acestui proces biologic complex, permiţînd analiza randamentului conversiei mecano-chimice în diferitele stări de funcţionare a muşchiului.

În ultimele cercetări de energetică a contracţiei musculare a început să se contureze şi posibilitatea de a obţine informaţii asupra însuşi mecanismului molecular al acestui proces. Astfel, din studiul energetic al stării de menţinere, s-a găsit asemănarea formei dependenţei Q_m de lungimea muşchiului cu cea a tensiunii izometrice de lungime. Această asemănare indică un paralelism al mecanismului producerii tensiunii izometrice şi cel al producerii Q_m. Din acest paralelism se poate arăta că scăderea tensiunii izometrice la lungimi peste valoarea L_0 „în situ“ pare plauzibil explicată prin modelul „cross-bridge“, dar la lungimi sub L_0 ea nu mai este valabilă datorită existenţei unei importante produceri de Q_m.

O altă observaţie energetică interesantă din acest punct de vedere este cea făcută de Aubert (1) care a arătat că diminuarea în timp a producerii Q_m are exact aceeaşi formă cu cea a relaxării, ceea ce iarăşi reflectă o similitudine de mecanism.

Această direcţie de deducere a unor informaţii despre mecanismul procesului contractil din date energetice pare a fi strîns înrudită cu o linie de cercetare cunoscută în fizică: coeficienţii fenomenologici din termodinamică proceselor ireversibile sînt obţinuţi pe cale experimentală ignorînd structura sistemului, pentru ca apoi să se caute a fi deduşi pe baza cunoaşterii acestei structuri.

BIBLIOGRAFIE

1. Aubert X., cap. III în: „Physiologie" (Ch. Kayser, Ed.), Ed. Méd. Flammarion, Paris, 1963.
2. Bornhorst W. J., J. E. Minardi: Biophys., J., *9*, 654, 1969
3. Caplan S. R.: Biophys. J., *8*, 1167, 1968
4. Davies R. E.: Nature (London), *199*, 1068, 1963
5. Ernst E.: Biophysics of the Striated Muscle, Akadémiai Kiado, Budapest, 1963.
6. Hill A. V.: Proc. Roy Soc. (London) B, *127*, 434, 1939
7. Hill A. V.: Proc. Roy. Soc. (London) B, *159*, 297, 1964
8. Huxley A. F.: Progr. Biophys. & Biophys. Chem. *7*, 255, 1957
9. Huxley H. E., J. Hanson: Nature (London), *173*, 973, 1954
10. Mommaerts W. F. H. M.: Physiol. Rev. *49*, 427, 1969
11. Mommaerts W. F. H. M.: Naturwiss. *57*, 210, 1970
12. Podolsky R. J. et al.: J. Biol. Chem. *217*, 603, 1955
13. Prigogine I. : Introduction à la thèrmodynamique des processus irréversibles, Dunod, Paris, 1968
14. Spencer M., C. R. Worthington: Nature (London), *187*, 388, 1960
15. Ullrick, W. C.: J. theor. Biol. *15*, 121, 1967
16. Wilkie D. R.: Progr. Biophys. & Biophys. Chem. *10*, 260, 1961.

NONEQUILIBRIUM THERMODYNAMICAL STUDY OF MUSCULAR CONTRACTION

ABSTRACT

The aim of this paper is to obtain an unitary picture of muscular contraction energetics, basing on the data in literature and using the concepts and methods of nonequilibrium thermodynamics.

After a short presentation of the contraction phenomenology, the characteristic parameters of the myofibril are defined. The dissipation function and the phenomenological equations associated with the processes in the myofibril are written. On this basis onre analyses the problem of the efficiency of chemo-mechanical energy conversion in the various kinds of contractions, considered as different functioning states of a linear self-regulated energy converter. Finally, some informations about the molecular mechanism of muscular contraction, which could be given by energetical data, are suggested.

Redactor principal: ŞTEFANIA BARBU
Tehnoredactor: GH. TIŢĂ

ANALELE UNIVERSITĂŢII BUCUREŞTI
FIZICĂ
Anul XX — 1971

Tiparul executat sub comanda
nr. 1785 la
Intreprinderea Poligrafică
„13 Decembrie 1918“,
str. Grigore Alexandrescu nr. 89–97
Bucureşti,
Republica Socialistă România.

BUDAPESTI MŰSZAKI EGYETEM
KÖZPONTI KÖNYVTÁRA
1848